Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP Instituto de Física "Gleb Wataghin" - IFGW

Tese de Doutorado

Propriedades Físicas de Sistemas com Interações Competitivas

Rafael Monteiro Fernandes

Orientador: Prof. Dr. Harry Westfahl Junior Grupo de Teoria, Laboratório Nacional de Luz Síncrotron

Co-Orientador: Prof. Dr. Amir Ordacgi Caldeira Departamento de Física da Matéria Condensada, IFGW

Este exemplar corresponde à redação final da tese de doutorado defendida pelo aluno Rafael Monteiro Fernandes e aprovada pela comissão julgadora (25/06/2008).

Hanny Mertfall Jimes

Campinas, 06 de Junho de 2008

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP

	F391p	Fernandes, Rafael Monteiro Propriedades físicas de sistemas com interações competitivas / Rafael Monteiro Fernandes Campinas, SP : [s.n.], 2008.				
		Orientadores: Harry Westfahl Junior e Amir Ordacgi Caldeira. Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".				
		 Auto-organização. Fases inomogêneas. Brazovskii, Modelo de. Ferromagnetos dipolares. Mott, Isolantes de. Westfahl Junior, Harry. Caldeira, Amir Ordacgi. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". Título. 				
	- Título en	n inglês: Physical properties of systems with competing interactions.				
	- Palavras	-chave em inglês (Keywords):				
	1. Self-organization 2. Inhomogeneous phases					
	3. Braz	ovskii model				
	 4. Dipol 5. Mott 	insulatore				
	- Áreade	concentração: Eisica da Matéria Condensada				
	Titulação	e Doutor em Ciências				
	- Ranca e	zaminadora:				
	Prof. Harry Westfahl Junior					
		-				

- Prof. Harry Westrahi Junior Prof. Eduardo Granado Monteiro da Silva Prof. Peter Alexander Bleinroth Schulz Prof. Caio Henrique Lewenkopf Prof. Daniel Gustavo Barci

-

- Data da defesa: 06/06/2008 Programa de Pós-Graduação em: Fisica -



Secretaria de Pós-Graduação - Tel: (19) 3521-5305 FAX: (19) 3521-4142

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE **RAFAEL MONTEIRO FERNANDES - RA 992348,** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN" DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 06/06/2008.

COMISSÃO JULGADORA:

We Jun Prof. Dr. Harry Westfahl Junior (Orientador do Candidato)

LNLS

Prof. Dr. Calo Henrique Lewenkopf DFT/UERJ

6

Prof. Dr. Daniel Gustavo Barci DFT/UERJ

Prof. Dr. Eduardo Granado Monteiro da Silva

DEQ/IFGW/UNICAMP

I.h. A.B. S.M

Prof. Dr. Peter Alexander Bleinroth Schulz DFMC/IFGW/UNICAMP

Universidade Estadual de Campinas - Instituto de Física Gleb Wataghin – Secretaria da Pós-Graduação CP 6165 – CEP 13083-970 - Campinas - SP – Fone: +55 19 3521-5306 / 3521-5279 / 3521-5280 e-mail: <u>secpos@lfi.unicamp.br</u>

"In this house, we obey the laws of thermodynamics!"

Homer Simpson,

after Lisa constructs a perpetual motion machine

"The laws of thermodynamics are very simple: Zeroth: You must play the game. First: You can't win. Second: You can't break even. Third: You can't quit the game." C. P. Snow

Aos meus pais, Francisco e Luzia

Agradecimentos

A Deus.

Ao Harry, não só pela orientação dedicada e impecável, mas também pela amizade construída e demonstrada ao longo destes três anos. Expresso meu reconhecimento por toda a atenção dispensada a mim e pelas inúmeras e valiosas discussões que tivemos, científicas ou não.

Ao Joerg Schmalian, orientador durante o estágio de doutorado em Ames (EUA), por sua acolhida e pela confiança depositada em mim. Agradeço sua inestimável contribuição para o meu amadurecimento científico.

Aos meus professores Amir Caldeira, Eduardo Miranda e Antônio Mansanares, por todos os conselhos e aprendizados.

Aos meus pais e meus irmãos, pelo apoio incondicional oferecido desde o primeiro momento no qual pensei em seguir esta carreira. Um apoio traduzido muito além de suporte material ou financeiro, mas, principalmente, expresso por carinho, reconhecimento e incentivo.

Aos amigos com quem dividi esta parte da minha vida, compartilhando os momentos de descontração e comemoração, mas também os dias de aflição e preocupação. Se é injusto citar apenas alguns nomes dentre tantas pessoas importantes, mais injusto ainda, além de deveras triste, é não citar nenhum. Por isso, minha menção especial àqueles que me acompanham nesta empreitada desde o ano de 1999, Sergio, Tulio, Davi e Pedro. Além dos amigos de fora da Física que há tantos anos estão ao meu lado, Carlão, Raphinha, Joões e Marília.

Ao pessoal do lamas, pelas inúmeras quintas-feiras nos bares de Campinas, além dos famosos churrascos de fim de semana. A todos os amigos da APGF, pelas incontáveis histórias juntos. À galera do basquete, pela persistência demonstrada em todos os treinos e campeonatos disputados; agora vocês vão precisar encontrar outro pivô.

Aos colaboradores científicos, e, em particular, à Letícia, companheira de sala e de MnAs por dois anos. Registro um agradecimento especial por disponibilizar as figuras da seção 2.1.

Ao apoio financeiro do CNPq, da CAPES e da Unicamp.

Resumo

Um dos objetivos centrais das Ciências Naturais é relacionar as estruturas dos mais diversos sistemas com as funções particulares que os caracterizam. Por exemplo, no que se refere a materiais, sejam eles sintéticos ou biológicos, a ciência está constantemente buscando a predição de diferentes propriedades macroscópicas a partir do conhecimento das suas estruturas microscópicas. Nesta tese, investigamos as propriedades magnéticas e de transporte de sistemas que apresentam interações competitivas em diferentes escalas de comprimento. Como resultado desta competição, surge um estado termodinâmico caracterizado por um parâmetro de ordem modulado, dando origem a uma série de configurações espacialmente inomogêneas. A termodinâmica destes estados modulados pode ser descrita pelo chamado modelo de Brazovskii, que prevê uma transição de primeira ordem, induzida pelas flutuações do parâmetro de ordem, entre a fase homogênea e a fase modulada. Há uma vasta gama de sistemas encontrados na Natureza que parecem se encaixar nesta descrição de Brazovskii, compreendendo estruturas tão díspares quanto cristais líquidos e condensados de píons em estrelas de nêutrons. No presente trabalho, investigamos dois sistemas físicos particulares. Motivados pela rica variedade de domínios observados experimentalmente em filmes finos magnéticos, estudamos as propriedades magnéticas de blocos ferromagnéticos dipolares com dimensões finitas e condições de contorno não-periódicas. Desenvolvendo uma modelagem baseada na solução da Hamiltoniana de Brazovskii, pudemos explicar, de maneira inédita e consistente, a estrutura de domínios magnéticos dos filmes finos de MnAs:GaAs, um promissor candidato a aplicações no campo da spintrônica. Além disso, estabelecemos uma relação clara entre o fenômeno de reorientação magnética e a mudança na forma das curvas de histerese observada nesses filmes. O segundo tipo de sistemas que investigamos foram os isolantes de Mott, cujas propriedades de transporte foram determinadas a partir do modelo de redes de resistores correlacionados. Considerando que a transição de Mott térmica pertence à classe de universalidade de Ising, mostramos que a condutividade macroscópica depende não apenas da magnetização, mas também da densidade de energia, dando origem a um comportamento de *crossover*. Através destes resultados, lancamos luz sobre a aparente e misteriosa incoerência entre as previsões teóricas e as medidas experimentais recentes envolvendo isolantes de Mott não-dopados. Prosseguindo para as fases inomogêneas dos isolantes de Mott dopados, estudamos a condutividade macroscópica das mesofases eletrônicas com ordenamento de carga esmético e nemático, as quais são encontradas nos niquelatos e nos cupratos, respectivamente. Inspirados nos conceitos da Física dos cristais líquidos, expressamos de forma bastante intuitiva a relação entre as propriedades de transporte e a termodinâmica das mesofases eletrônicas anisotrópicas, descrita pelo modelo de Brazovskii.

Abstract

One of the prime objectives of Natural Sciences is to relate the structures of systems to their characteristic functions. For example, in what concerns materials, either synthetic or biologic, science is constantly seeking for the prediction of different macroscopic properties from the knowledge of their microscopic structure. In this thesis, we investigate the magnetic and transport properties of systems with competing interactions in distinct length scales. As a result of such a competition, there is a thermodynamic state characterized by a modulated order parameter, originating a set of spatially inhomogeneous configurations. The thermodynamics of these modulated states can be described by the so-called Brazovskii model, which predicts a fluctuation induced first order transition from the homogeneous phase to the modulated phase. There is a large diversity of systems for which the Brazovskii description seems suitable, including utterly disparate structures such as liquid crystals and pion condensates in neutron stars. In the present work, we investigate two particular physical systems. Motivated by the rich variety of domains experimentally observed in magnetic thin films, we study the magnetic properties of ferromagnetic dipolar slabs with finite dimensions and non-periodic boundary conditions. After developing a model based on the solution of the Brazovskii Hamiltonian, we were able to explain, in a consistent and novel way, the magnetic domain structures of MnAs:GaAs thin films, which are promising candidates for spintronics devices. Moreover, we established a clear connection between the film's magnetic reorientation and the experimentally observed change in the hysterisis loops shape. The second class of systems we investigated were the Mott insulators, whose transport properties were determined from the correlated resistor network model. After considering that the finite temperature Mott transition belongs to the Ising universality class, we showed that the macroscopic conductivity depends not only on the magnetization, but also on the energy density, giving rise to crossover behaviour. Using these results, we shed light upon the apparent and mysterious inconsistency between the theoretical predictions and the experimental measurements regarding undoped Mott insulators. Proceeding to the inhomogeneous phases of doped Mott insulators, we studied the macroscopic conductivity of electronic mesophases with smectic and nematic charge ordering, which are found in the nickelates an in the cuprates, respectively. Inspired by the concepts from the Physics of liquid crystals, we expressed in an intuitive way the connection between the transport properties and the thermodynamics of anisotropic electronic mesophases described by the Brazovskii model.

Sumário

Introdução							
Capítı	Capítulo 1. O Modelo de Brazovskii						
1.1.	Separação de fases e interações competitivas	7					
1.2.	Transições de primeira ordem induzidas por flutuações	13					
1.3.	Solução de campo médio auto-consistente do modelo de Brazovskii	20					
1.4.	Flutuações elásticas e o derretimento da fase modulada	28					
Capítı	ulo 2. Ferromagnetos Dipolares com Dimensões Finitas	41					
2.1.	Estrutura magnética dos filmes finos de MnAs:GaAs	41					
2.2.	2.2. Hamiltoniana efetiva de Ginzburg-Landau: o papel da interação dipolar						
2.3.	Solução de campo médio auto-consistente: diagrama de fases	53					
	2.3.1. Fase de listras	55					
	2.3.2. Fase tipo bolhas	60					
2.4.	Aplicação aos filmes finos de MnAs:GaAs	64					
2.5.	Além da simetria Ising: o modelo XZ	67					
2.6.	Reorientação magnética e curvas de histerese	71					
Capítı	ulo 3. Isolantes de Mott Dopados	81					
3.1.	3.1. Propriedades de transporte e as fases microscópicas dos isolantes de Mott: sais orgânicos,						
	cupratos e niquelatos	81					
3.2.	3.2. Descrição microscópica de isolantes de Mott dopados e não-dopados						
3.3.	3.3. Redes de resistores correlacionados e expansão perturbativa da condutividade						
3.4.	$\label{eq:transporte} Transporte \ em \ compostos \ não-dopados: \ classe \ de \ universalidade \ da \ transição \ térmica \qquad .$	101					
3.5.	Transporte em compostos dopados: fases esmética e nemática	112					
	3.5.1. Fase esmética	113					
	3.5.2. Fase nemática	118					
Capítı	Capítulo 4. Conclusões						
Referências Bibliográficas							
Apêndice A. Transição de Kosterlitz-Thouless							
Apêndice B. Transformação de Hubbard-Stratonovich							
Apêndice C. Paredes de domínios de Néel em blocos ferromagnéticos dipolares 151							
Apêndice D. Percolação e redes de resistores aleatórios							

Introdução

Fases espacialmente inomogêneas, associadas a quebras de simetrias translacionais e/ou rotacionais, são encontradas em uma enorme variedade de sistemas físicos, sob as mais diversas condições ambientes de pressão, temperatura e campos eletromagnéticos externos. Apesar de o tamanho típico das inomogeneidades variar desde escalas de comprimento micro e mesoscópicas até escalas genuinamente macroscópicas, são relativamente poucas as variedades das formas destas fases inomogêneas, compreendendo um pequeno número de morfologias bem definidas, tais quais fases de listras, de bolhas, de lamelas e tipo tabuleiro de xadrez [1].

À primeira vista, os sistemas nos quais estas fases se manifestam parecem apresentar poucos aspectos em comum. Nos materiais de interesse da chamada Física da Matéria Condensada Dura - supercondutores, materiais magnéticos, isolantes de Mott [2, 3] - a interação eletrônica e a energia cinética são as principais responsáveis pelas suas propriedades macroscópicas (resistividade, susceptibilidade magnética, calor específico). Contudo, nos sistemas investigados pela Física da Matéria Condensada Mole - polímeros, cristais líquidos, microemulsões [4, 5] - o comportamento da energia livre é dominado pela entropia, e não pela energia interna. Assim, o contraste entre os poucos tipos de formas assumidas por estas fases inomogêneas e a larga gama de sistemas microscópicos associados a elas sugere a atuação de algum mecanismo bastante geral, comum a todos eles.

Os indícios experimentais e teóricos reunidos apontam para a interpretação de que as fases inomogêneas são manifestações de configurações moduladas do parâmetro de ordem termodinâmico do sistema físico microscópico subjacente [1]. De fato, as distintas morfologias observadas podem ser descritas por combinações de vetores de onda da modulação de mesma magnitude, mas sentidos e direções diferentes. O fato de poucos tipos de formas serem assumidas por estas fases está associado ao custo energético das configurações referentes às possíveis combinações entre os vetores de onda da modulação.

Nesta abordagem, a modulação do parâmetro de ordem surge como o resultado da competição entre interações de tendências distintas, atuando em diferentes escalas de comprimento do sistema: em geral, tem-se uma interação forte, de curto alcance, que tende a ordenar o sistema uniformemente, e outra fraca, porém de longo alcance, que tende a frustrar este ordenamento¹. Desse modo, no que concerne as fases inomogêneas, não importam os tipos das interações atuantes, mas apenas seu caráter competitivo - por exemplo, a interação de troca versus a dipolar em sistemas magnéticos [6] ou, no caso dos copolímeros de dibloco, a competição entre a interação de van der Waals, que favorece os contatos entre monômeros de mesmo tipo, e os vínculos

¹ Conforme explicaremos durante o texto principal, no caso de um parâmetro de ordem conservado, a interação de curto alcance tende a provocar uma separação de fases no sistema.

volumétricos introduzidos pelo ponto de ligação covalente do copolímero [7]. O período das modulações - e, conseqüentemente, o comprimento típico das inomogeneidades - é, na maioria das vezes, uma função decrescente da razão entre as intensidades da interação de longo alcance e da interação de curto alcance, o que explica a variedade de tamanhos dos domínios observados.

Nosso objetivo, nesta tese, é investigar os efeitos da morfologia e da termodinâmica das fases inomogêneas nas propriedades macroscópicas dos sistemas a elas associados - em particular, nas propriedades magnéticas e de transporte. Em geral, estas estruturas inomogêneas podem ser evidenciadas experimentalmente por medidas de espalhamento de raios X ou de nêutrons, ou ainda por imagens obtidas através de técnicas de microscopia eletrônica. A possibilidade de se correlacionar a estrutura às funções destes sistemas por meio de modelos teóricos é de extrema valia para o desenvolvimento de materiais cujas propriedades possam ser previamente "desenhadas".

No que concerne a termodinâmica das fases moduladas, o modelo analítico mais simples capaz de capturar a essência dos fenômenos físicos envolvidos é o chamado modelo de Brazovskii [8]. Nesta abordagem, as flutuações de mais baixa energia do parâmetro de ordem estendem-se ao redor de uma hiper-superfície esférica no espaço de momentos. Tal cenário contrasta com os modelos termodinâmicos de fenômenos críticos mais comumente estudados, nos quais as excitações fundamentais se dão ao redor de um único ponto no espaço de momentos - no modelo ϕ^4 , por exemplo, isto ocorre para q = 0 [9]. Assim, as flutuações na Hamiltoniana de Brazovskii desempenham um papel fundamental, de modo que a aproximação mais simples de campo médio falha completamente na descrição do diagrama de fases do sistema. De fato, seja usando-se métodos de campo médio auto-consistentes ou seja usando-se técnicas baseadas no Grupo de Renormalização, mostra-se que as flutuações do parâmetro de ordem induzem uma transição de primeira ordem entre a fase desordenada e a fase modulada, dando origem a fenômenos fora do equilíbrio característicos deste tipo de transição, como nucleação e histerese. Há que se mencionar que a Hamiltoniana de Brazovskii surge não só no âmbito da Física da Matéria Condensada, mas também em sistemas de interesse da Física de Altas Energias, como os condensados de píons em estrelas de nêutrons [10].

Usando os resultados do modelo de Brazovskii, estudamos, primeiramente, as propriedades magnéticas e a estrutura de domínios de filmes finos magnéticos crescidos sobre substratos semicondutores, um tipo de sistema com possíveis aplicações no promissor campo da spintrônica. Nosso outro interesse é nas propriedades de transporte dos isolantes de Mott antiferromagnéticos dopados, os quais apresentam fases eletrônicas semelhantes às fases esmética e nemática dos cristais líquidos, e que podem ser descritas pela Hamiltoniana de Brazovskii.

No capítulo 1, apresentamos as características gerais do modelo de Brazovskii, que constitui o principal instrumento para a subseqüente investigação das propriedades macroscópicas dos sistemas com interações competitivas de nosso interesse. Mostramos como a competição de interações em diferentes escalas dá origem a uma Hamiltoniana efetiva de Ginzburg-Landau cujo estado mais estável corresponde a uma fase modulada. Estudando os efeitos das flutuações de mais baixa energia do parâmetro de ordem, indicamos como a transição de segunda ordem entre a fase desordenada e a modulada, prevista pela abordagem de campo médio, é frustrada e suplantada por uma transição de primeira ordem induzida por flutuações. Em seguida, apresentamos a solução de campo médio auto-consistente da Hamiltoniana de Brazovskii, que será utilizada durante todo o trabalho, comparando-a, qualitativamente, com soluções oriundas de outros métodos, como o Grupo de Renormalização e simulações numéricas. Por fim, investigamos o efeito de outros modos de flutuação do parâmetro de ordem no diagrama de fases descrito pela solução auto-consistente - em particular, focamos nas flutuações elásticas da fase de listras bidimensional. Baseamo-nos na abordagem de Toner e Nelson [11] para demonstrar que, na ausência de campos cristalinos fortes, a fase de listras é derretida, dando origem a uma fase nemática - isto é, uma fase que não possui ordem de (quase) longo alcance posicional, mas apenas ordem de (quase) longo alcance orientacional. Incluindo a atuação dos defeitos topológicos, indicamos como a fase nemática sofre uma transição de Kosterlitz-Thouless para a fase líquida isotrópica.

O capítulo 2 é dedicado ao estudo dos efeitos de tamanho e das condições de contorno sobre as propriedades magnéticas de um bloco ferromagnético dipolar com largura e espessura finitas. A motivação experimental reside na intrincada estrutura de domínios dos estreitos terraços ferromagnéticos que são observados nos filmes finos magnéticos de MnAs crescidos sobre o substrato semicondutor GaAs, para um largo intervalo de temperaturas de coexistência das fases $\alpha \in \beta$. Mostramos como a inclusão das interações de Ising e dipolar, bem como das condições de contorno de Dirichlet apropriadas, levam naturalmente à Hamiltoniana de Brazovskii em um espaço de momentos de dimensões finitas. Generalizando a solução auto-consistente para este caso, obtemos que a transição de primeira ordem induzida por flutuações continua a ocorrer, apesar da discretização da outrora superfície contínua de mínima energia da Hamiltoniana, ao redor da qual atuam as excitações menos energéticas. Demonstramos que, de maneira geral, a fase de listras com menor modulação ao longo da direção limitada é a mais estável, e investigamos os efeitos de comensurabilidade entre a largura do bloco e o período da modulação sobre a estabilidade das fases obtidas.

Aplicando este ferramental matemático ao caso concreto do MnAs:GaAs, propomos uma explicação consistente para o número de domínios observado dentro dos terraços ferromagnéticos a partir de imagens de microscopia de força magnética (MFM), no intervalo de altas temperaturas da região de coexistência. Para descrever a estrutura de domínios no intervalo de baixas temperaturas da região de coexistência, consideramos o caráter vetorial dos spins do bloco, desenvolvendo um funcional de Ginzburg-Landau para o modelo XZ dipolar. Em seguida, inspirados pelos resultados da minimização da Hamiltoniana efetiva obtida, concebemos um modelo fenomenológico capaz de descrever o fenômeno de reorientação da magnetização do terraço, observada nas imagens de MFM. Aplicando o método de Stoner-Wohlfarth [12], relacionamos esta reorientação com a mudança na forma das curvas de histerese obtidas a partir de medidas de espalhamento ressonante de raios X. Os resultados apresentados neste capítulo deram origem a três artigos, que já estão publicados [13, 14, 15].

No capítulo 3, exploramos as propriedades de transporte de isolantes de Mott antiferromagnéticos dopados - em particular, consideramos óxidos de metais de transição, como os cupratos e os niquelatos. Para certas concentrações de dopantes, há fortes indícios experimentais de que estes compostos apresentam fases com listras ricas em buracos alternadas por listras pobres em buracos, resultando em um sistema cuja condutividade microscópica é inomogênea - isto é, maior nas listras ricas em buracos (mais condutoras) do que em relação às listras pobres em buracos (menos condutoras). Baseados nos trabalhos de Kivelson et al. [16], argumentamos que esta fase de listras pode ser descrita pelo modelo de Brazovskii, e usamos a solução de campo médio auto-consistente para descrever sua termodinâmica. Resolvendo perturbativamente o problema de uma rede inomogênea de resistores correlacionados, obtemos uma expansão da condutividade macroscópica da fase inomogênea em potências do contraste entre as condutividades microscópicas das diferentes fases. Através desta expressão, mostramos que, para o caso de uma fase de listras com ordenamento esmético, o espectro de flutuações particular do modelo de Brazovskii é refletido pelo comportamento anisotrópico do salto na condutividade, que ocorre concomitantemente à transição de primeira ordem. Os resultados obtidos trazem novos elementos para o entendimento das propriedades de transporte dos niquelatos, além de fornecerem previsões passíveis de serem verificadas experimentalmente. Para fazer contato com os experimentos envolvendo os cupratos, aplicamos o mesmo formalismo para o caso em que a fase de listras é derretida pelas flutuações elásticas, dando origem a um ordenamento nemático. Demonstramos a existência de uma relação linear entre a anisotropia da condutividade e o parâmetro de ordem nemático, oferecendo uma explicação mais simples e mais intuitiva para a sua ocorrência do que a encontrada na literatura [17], onde são consideradas as flutuações quânticas, e não clássicas, das paredes das listras.

Ainda neste capítulo, o mesmo formalismo geral da expansão perturbativa da condutividade de uma rede de resistores correlacionados é usado para investigar um outro problema, a saber, a classe de universalidade da transição de Mott térmica, associada a isolantes de Mott não-dopados. Este problema foi proposto pelo Prof. Dr. Joerg Schmalian, do Laboratório de Ames, na ocasião do meu estágio de doutorado sanduíche no exterior, e realizado em colaboração com o grupo liderado pelo Prof. Dr. Eduardo Fradkin, da Universidade de Illinois em Urbana-Champaign. A temperaturas finitas, os isolantes de Mott não-dopados também podem formar fases inomogêneas, mas que não estão organizadas em listras ou em qualquer outro padrão. Apesar de haver interações competitivas neste problema, as escalas de comprimento associadas a elas não são muito diferentes - primeiros vizinhos para o termo de hopping e local para o termo de Hubbard. Usando resultados de investigações teóricas prévias, descrevemos a termodinâmica da fase inomogênea ao longo da linha de coexistência, formada por regiões metálicas e isolantes, por um parâmetro de ordem de Ising. Em seguida, mostramos que, perto do ponto crítico, a condutividade macroscópica do sistema depende não só da magnetização, mas também do comportamento singular da densidade de energia, dando origem a um comportamento de *crossover*. De posse destes resultados, revisitamos experimentos recentes sobre medidas de condutividade em sistemas bi e tridimensionais próximos da transição de Mott, mostrando que os expoentes não-convencionais por eles obtidos podem, de fato, ser atribuídos à classe de universalidade de Ising. A pesquisa envolvida no capítulo 3 resultou em dois artigos [18, 19], sendo que o primeiro já está publicado e o segundo está submetido para publicação.

Por fim, o capítulo 4 traz as conclusões gerais da tese, bem como as perspectivas para investigações posteriores. Quatro apêndices esmiuçam conceitos que foram apenas tangenciados no texto principal, a saber: a transição de Kosterlitz-Thouless, intimamente relacionada à excitação térmica de defeitos topológicos (Apêndice A) ; a transformação de Hubbard-Stratonovich, com a qual podem ser obtidas Hamiltonianas efetivas de Ginzburg-Landau a partir de Hamiltonianas microscópicas (Apêndice B); o cálculo da largura das paredes de domínio de Néel dos blocos ferromagnéticos dipolares finitos através da minimização da energia total (Apêndice C); o modelo das redes de resistores aleatórios no limite de contraste infinito, cujas propriedades de transporte possuem uma íntima relação com as propriedades fractais do aglomerado percolativo incipiente (Apêndice D).

Capítulo 1

O Modelo de Brazovskii

Neste capítulo, será introduzido o modelo de Brazovskii, no qual se fundamenta a maior parte da pesquisa apresentada nesta tese. Trata-se de um modelo mínimo capaz de capturar as principais características físicas de um sistema com interações competitivas, e que tem sido utilizado não só no contexto de sistemas fortemente correlacionados - objetos de investigação deste trabalho - mas também na chamada Física da Matéria Condensada Mole, relacionada a polímeros, microemulsões e cristais líquidos. Apresentamos, no que se segue, as características gerais do modelo, discutindo sua emergência na descrição de sistemas de origens tão distintas. As propriedades físicas dos sistemas descritos por ele serão calculadas pela solução de campo médio auto-consistente da Hamiltoniana efetiva, que fornece um cenário fisicamente consistente e matematicamente confiável para serem discutidas as predições mais abrangentes deste modelo. Por fim, serão apresentados incrementos a esta aproximação através da inclusão de outros modos de flutuação usualmente presentes nesse tipo de sistema - os chamados modos elásticos - e o mecanismo pelo qual eles alteram o diagrama de fases previsto pelo método auto-consistente.

1.1. Separação de fases e interações competitivas

Inúmeros sistemas físicos apresentam a tendência a se auto-organizarem em fases de equilíbrio não triviais, ou seja, fases que não são meramente uniformes, mas caracterizadas por uma intrincada estrutura de domínios de extensões espaciais que variam da escala dos nanômetros à escala dos centímetros [1]. Por exemplo, em sistemas quase-bidimensionais, fases do tipo listras (do inglês *stripes*) surgem em compostos de óxidos de metais de transição dopados [20], enquanto fases do tipo bolhas são observadas em filmes finos magnéticos sujeitos a campos magnéticos externos [21]. Já no caso tridimensional, copolímeros de dibloco mostram fases lamelares, cúbicas ou cilíndricas com simetria hexagonal [22] e microemulsões apresentam estruturas lamelares de auto-organização [23]. Além destes, vários outros sistemas têm estruturas morfológicas similares às descritas anteriormente, tanto no domínio da Física da Matéria Condensada Dura - por exemplo, filmes de supercondutores tipo I e ferrofluidos - quanto no domínio da Física da Matéria Condensada Mole - filmes de Langmuir, cristais líquidos, fluidos sob uma instabilidade de Rayleigh-Bénard (ver referências citadas em [1]). Uma interessante discussão sobre os paralelos entre estas duas grandes sub-áreas da Física da Matéria Condensada pode ser encontrada em [24].

A princípio, seria de se esperar a proliferação de uma considerável variedade de padrões de auto-organização, dados os diferentes tipos de interações presentes nessa vasta gama de



Figura 1.1. Fases tipo listras (esquerda) e tipo bolhas com simetria hexagonal (direita) em um sistema bidimensional. Cores claras e escuras diferenciam domínios nos quais o parâmetro de ordem assume diferentes valores.

sistemas. Contudo, as estruturas morfológicas observadas podem ser classificadas em um número relativamente restrito de padrões geométricos: em duas dimensões, verificam-se principalmente a existência de fases do tipo listras e do tipo bolhas, enquanto que para sistemas tridimensionais aparecem as fases lamelares, as cilíndricas hexagonais e as esféricas cúbicas. Esta evidência, portanto, aponta para uma origem física comum a estas estruturas de domínios mesoscópicas. Tal universalidade morfológica, por assim dizer, é atribuída à manifestação de fases moduladas resultantes da competição de interações em diferentes escalas do sistema.

Fisicamente, o que ocorre é que, enquanto uma interação forte de curto alcance tende a separar o sistema em duas fases macroscópicas distintas de modo a evitar o alto custo energético da criação de paredes de domínios, uma outra interação mais fraca, porém de longo alcance, tende a frustrar a formação destes extensos monodomínios. O resultado desta competição é que a fase de menor energia não é mais a uniforme, mas sim um estado modulado cujo período característico é uma função monotonicamente decrescente da razão entre as magnitudes das interações fraca e forte. Assim, a separação de fases em escala macroscópica dá lugar a uma auto-organização em que as fases se alternam em escalas mesoscópicas. Neste contexto, as estruturas de domínios observadas experimentalmente e discutidas no parágrafo anterior nada mais são que manifestações de diferentes tipos de modulação. Por exemplo, as fases tipo listras em 2D e as lamelares em 3D podem ser entendidas como as mais simples fases moduladas que o sistema pode assumir, resultantes de uma modulação unidimensional do parâmetro de ordem. Já as fases do tipo bolhas em 2D ou as cilíndricas hexagonais em 3D podem ser descritas como padrões de modulações originados da combinação de múltiplos vetores de onda de mesmo módulo. A figura 1.1 ilustra alguns destes distintos padrões morfológicos. Fica claro que inúmeras fases metaestáveis podem surgir nesse cenário, abrindo inclusive a possibilidade de ocorrência de comportamentos não-ergódicos intrínsecos ao sistema [25].

Matematicamente, o modelo mais simples capaz de expressar a energia de um microestado inomogêneo de um sistema cuja fase ordenada é modulada é caracterizado por:

$$\mathcal{H}[\phi] = \int d^d x \left[\frac{\tau_0}{2} \phi^2\left(\vec{x}\right) + \phi\left(\vec{x}\right) \frac{\left(\nabla^2 + q_0^2\right)^2}{8q_0^2} \phi\left(\vec{x}\right) + \frac{u}{4} \phi^4\left(\vec{x}\right) \right],$$
(1.1)

em que $\phi(\vec{x})$ denota o parâmetro de ordem, q_0 é o módulo do vetor de onda descrevendo a modulação da fase ordenada e τ_0 e u são parâmetros associados às particularidades microscópicas do sistema. Na maior parte dos casos de interesse, τ_0 é uma função linear da temperatura e, portanto, é o parâmetro controlável experimentalmente. De agora em diante, toda vez que nos referirmos à função \mathcal{H} , chamá-la-emos de a Hamiltoniana de Ginzburg-Landau do sistema [9]. Contudo, deve-se ter em mente que ela não é a Hamiltoniana microscópica propriamente dita, mas sim um funcional efetivo, resultante de uma expansão em potências de ϕ , que fornece a energia do microestado $\phi(\vec{x})$ em unidades da energia térmica k_BT . Para a expansão particular (1.1), fica evidente que se está assumindo um sistema com simetria por inversões, e portanto não há campos conjugados presentes. Neste contexto, a função de partição Z do sistema é obtida através da integração funcional:

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-\mathcal{H}[\phi]} \,. \tag{1.2}$$

A solução auto-consistente da Hamiltoniana (1.1), bem como o seu diagrama de fases, foram estudados pioneiramente por Brazovskii no contexto de cristais líquidos colestéricos [8], motivo pelo qual vamos nos referir a (1.1) como a Hamiltoniana de Brazovskii daqui por diante. Antes de investigarmos suas propriedades, vamos discutir como ela surge naturalmente na descrição de uma variedade de sistemas físicos diferentes. Especificamente, focaremos nos óxidos de metais de transição dopados [26], em filmes finos magnéticos com forte anisotropia uniaxial [6], nos copolímeros de dibloco [7] e nas microemulsões [27]. Todos esses sistemas podem ser descritos por um parâmetro de ordem escalar $\phi(\vec{x})$ que assume diferentes significados em cada caso: nos óxidos dopados, ele denota a flutuação da densidade de carga local em relação à densidade média, de modo que $\phi(\vec{x}) > 0$ representa uma região rica em buracos, enquanto $\phi(\vec{x}) < 0$ representa uma região pobre em buracos. Nos filmes finos, o parâmetro de ordem se refere à magnetização na direção do eixo anisotrópico; já nos copolímeros e nas microemulsões, ele está associado às flutuações, respectivamente, da fração de volume local de um dos monômeros e da fração de volume local da molécula polar.

Conforme explicado anteriormente, a Hamiltoniana (1.1) surge de uma competição entre uma interação forte de curto alcance e uma interação fraca de longo alcance. Da razão entre as suas magnitudes é que depende o período característico da fase modulada $d = 2\pi/q_0$. A parte referente à interação forte pode ser descrita por um simples modelo ϕ^4 :

$$\mathcal{H}_{1}[\phi] = \int d^{d}x \left[\frac{\tau_{0}}{2} \phi^{2}(\vec{x}) + \left| \vec{\nabla}\phi(\vec{x}) \right|^{2} + \frac{u}{4} \phi^{4}(\vec{x}) \right].$$
(1.3)

Fica claro que, para $\tau_0 < 0$, a energia é minimizada por uma configuração uniforme, já que variações espaciais do parâmetro de ordem custam energia ao sistema, devido à presença do termo $\left|\vec{\nabla}\phi\right|^2$. Assim, no caso de o parâmetro de ordem ser conservado ($\int d^d x \phi(\vec{x}) = \text{cte}$), como ocorre nos óxidos dopados, nos copolímeros e nas microemulsões, a Hamiltoniana acima prevê uma separação macroscópica das fases envolvidas, de modo a haver apenas uma parede de domínio. Um exemplo bastante simples relacionado à experiência cotidiana é o caso da mistura óleo-água, que pode ser encarada como uma microemulsão sem surfactante: o óleo, formado por moléculas apolares, separa-se da água, formada por moléculas polares, originando um sistema bifásico bem definido. No caso dos copolímeros de dibloco, os dois monômeros $A \in B$ que compõem o copolímero também tendem a se separar em uma fase macroscópica rica em B, já que contatos AB possuem uma atração de van der Waals menor que a dos contatos AA ou BB. Já no caso dos óxidos dopados, os

portadores de carga introduzidos pelos dopantes (usualmente, buracos) delocalizam-se em uma região separada daquela ocupada pelos spins localizados do metal de transição, dando origem a uma região fortemente condutora apartada de uma outra região com fraca capacidade de condução elétrica.

Na situação em que o parâmetro de ordem não é conservado, como nos filmes magnéticos com forte anisotropia uniaxial, o sistema não possui nenhum vínculo adicional que o obrigue a criar paredes de domínio, de modo que a tendência expressa por (1.3) para $\tau_0 < 0$ é a de uma única fase uniforme com a magnetização apontando para cima ou para baixo, sem interface alguma. A transição da fase desordenada para a fase ordenada é acompanhada por uma quebra espontânea de simetria, já que o parâmetro de ordem "escolhe" arbitrariamente uma direção, de maneira que a fase ordenada perde a simetria por inversão que a Hamiltoniana (1.3) possui¹.

Enquanto a interação forte de curto alcance pode ser descrita por (1.3) para todos esses sistemas, a interação fraca de longo alcance pode ser descrita, de uma maneira geral, pela expressão:

$$\mathcal{H}_{2}[\phi] = Q \int d^{d}x d^{d}x' e^{-\left|\vec{x} - \vec{x}'\right| / \xi_{D}} \frac{\phi\left(\vec{x}\right) \phi\left(\vec{x}'\right)}{\left|\vec{x} - \vec{x}'\right|^{n}}, \qquad (1.4)$$

que corresponde, grosso modo, a uma interação de Coulomb blindada generalizada, em que Q é proporcional ao inverso da permissividade elétrica e ξ_D é o comprimento de blindagem. Analisemos o significado destes termo separadamente para cada sistema: nos óxidos dopados, a repulsão Coulombiana entre cargas de mesma espécie é quem frustra a separação de fases ditada pela interação de curto alcance, já que o custo energético de uma fase com todos os buracos concentrados na mesma região seria muito alto. Assim, como $\phi(\vec{x})$ denota a flutuação da densidade de carga local em relação à densidade média, Q pode ser interpretada como a magnitude da interação Coulombiana, e os parâmetros $n \in \xi_D$ assumem os valores n = 1 e $\xi_D \to \infty$.

No caso dos filmes magnéticos anisotrópicos, em que $\phi(\vec{x})$ refere-se à magnetização uniaxial, as dimensões finitas do filme fazem com que a interação dipolar entre os momentos magnéticos seja sempre relevante. Sua tendência em desalinhá-los pode ser traduzida em uma tendência em criar o maior número possível de paredes de domínios, frustrando a existência de uma fase uniforme, prevista por (1.3). Assim, no contexto da expressão (1.4), Q denota a razão entre as magnitudes da interação dipolar e da interação de troca, e os parâmetros $n \in \xi_D$ assumem os valores $n = 3 \in \xi_D \to \infty$.

Já para o caso das microemulsões, a adição de moléculas surfactantes à mistura óleo-água frustra a separação de fases devido aos vínculos estequiométricos introduzidos pelas moléculas anfifílicas. Enquanto uma de suas extremidades - a hidrofóbica - prefere se ligar às moléculas de óleo, a outra extremidade, hidrofílica, prefere a ligação com as moléculas polares da água. Desse modo, a presença do surfactante origina uma interação efetiva atrativa entre as moléculas de óleo e de água, que pode ser expressa por (1.4). Nesta situação, n assume o valor 1, a constante Q é proporcional à fração de volume do surfactante e ξ_D , ao comprimento médio de suas moléculas. Vale salientar que, como ξ_D é finito, esta interação é de alcance mais restrito

¹ Obviamente, a arbitrariedade só ocorre na ausência completa de um campo conjugado, uma vez que um campo infinitesimal já é capaz de determinar a direção preferencial do sistema.

que aquelas relacionadas aos sistemas anteriores, em que não havia blindagem propriamente dita. De qualquer modo, ainda assim, ela se estende por uma região maior que a interação de curto alcance descrita pelo modelo ϕ^4 .

Por fim, no caso dos copolímeros, a interação fraca de longo alcance surge devido ao fato de a molécula composta pelos monômeros $A \in B$ ser incompressível e possuir um ponto de ligação covalente. Os vínculos introduzidos pela simples existência deste ponto originam uma Hamiltoniana efetiva de interação repulsiva entre monômeros de mesma espécie que pode ser descrita pela mesma expressão (1.4), com $n = 1, \xi_D \to \infty$ e uma constante Q proporcional à fração de volume média dos monômeros.

Em todos os sistemas descritos acima, o resultado da competição entre as tendências opostas expressas por (1.3) e por (1.4) é o surgimento de uma fase modulada em detrimento de uma separação de fases (ou de uma fase uniforme, no caso de o parâmetro de ordem não ser conservado). Isto pode ser visto mais diretamente no espaço de Fourier: definimos a transformada de Fourier de uma função qualquer $f(\vec{x})$ por:

$$f_{\vec{q}} = \int d^d x f\left(\vec{x}\right) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}},\tag{1.5}$$

de modo que sua transformada inversa é dada por:

$$f(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d q f_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}} \,.$$
(1.6)

No espaço de Fourier, a Hamiltoniana total assume a seguinte forma:

$$\mathcal{H}[\phi] = \frac{1}{2(2\pi)^d} \int d^d q \phi_{\vec{q}} [\tau_0 + g(q)] \phi_{\vec{-q}} + \frac{u}{4(2\pi)^{3d}} \int d^d q_1 d^d q_2 d^d q_3 \phi_{\vec{q}_1} \phi_{\vec{q}_2} \phi_{\vec{q}_3} \phi_{-\vec{q}_1 - \vec{q}_2 - \vec{q}_3}, \qquad (1.7)$$

em que a competição entre as interações está expressa unicamente pela função $g(q) = g_1(q) + g_2(q)$, que contém um termo devido a \mathcal{H}_1 e outro devido a \mathcal{H}_2 . O primeiro é obtido diretamente do modelo ϕ^4 , $g_1(q) = q^2$, traduzindo a tendência de o sistema minimizar a energia através da formação de um estado uniforme q = 0. Já o segundo termo depende da forma da interação de longo alcance em questão; todavia, em todos os casos de interesse, como uma boa aproximação pode-se tomar $g_2(q) = Qq^{-n'}$, em que o expoente $n' \in \mathbb{N}$ depende das particularidades do sistema. Assim, a frustração é refletida pelo fato de este termo assumir seu menor valor apenas quando $q \to \infty$, o que corresponderia a um estado "infinitamente modulado". Na figura 1.2, apresentamos o comportamento geral da função g(q) como resultado da soma destes dois termos individuais. Vale mencionar que, no caso em que ξ_D é finito, temos, na verdade, $g_2(q) = (q^n + \xi_D^{-n})^{-1}$, de modo que a aproximação descrita anteriormente só é válida para escalas de comprimento muito menores que ξ_D .

Logo, fica claro que a função g(q) da Hamiltoniana total (1.7) encontra o seu mínimo para um vetor de onda com módulo não nulo $q_0 \sim Q^{\frac{1}{n'+2}}$, correspondendo a um estado modulado. A superfície de mínima energia no espaço de Fourier, também chamado de espaço de momentos,



Figura 1.2. Função g(q) (linha sólida em vermelho) da Hamiltoniana de Brazovskii no espaço de Fourier, equação (1.7), e suas componentes $g_1(q)$ e $g_2(q)$ (linhas pontilhadas) referentes às interações de curto e longo alcance, respectivamente.



Figura 1.3. Superfície de mínima energia $q = q_0$ da Hamiltoniana de Brazovskii, representada no espaço de Fourier. Por simplicidade, mostramos o caso bidimensional.

é descrita, portanto, por um círculo de raio q_0 , conforme esquematizado na figura 1.3. Através da expansão de g(q) em série de Taylor,

$$g(q) = g(q_0) + \frac{1}{2} (q - q_0)^2 \left(\frac{d^2 g}{dq^2}\right)\Big|_{q_0} , \qquad (1.8)$$

torna-se evidente que a Hamiltoniana assume a forma (1.7), após considerarmos a simetria do sistema por inversões do parâmetro de ordem, além de realizar um re-escalamento apropriado dos campos e do parâmetro τ_0 proporcional à temperatura reduzida. Neste contexto, podemos expressar as diversas estruturas morfológicas discutidas anteriormente: a fase tipo listras e a fase lamelar ficam descritas por:

$$\langle \phi_{\vec{q}} \rangle = \frac{A}{(2\pi)^d} \left[\delta \left(\vec{q} - q_0 \hat{n} \right) + \delta \left(\vec{q} + q_0 \hat{n} \right) \right]$$

$$\langle \phi \left(\vec{x} \right) \rangle = 2A \cos \left(q_0 \hat{n} \cdot \vec{x} \right) ,$$

$$(1.9)$$

	óxidos de metais de transição dopados [28]	filmes finos magnéticos [6]	copolímeros de dibloco [7]	microemulsões [27]
parâmetro de ordem	flutuação na densidade de carga local	magnetização ao longo do eixo de anisotropia	flutuação na fração de volume do monômero A	flutuação na fração de volume da molécula polar
origem da interação forte (curto alcance)	interação antiferromagnética entre spins localizados + delocalização dos portadores	interação de troca	contatos AB energetica- mente mais custosos que contatos AA e BB (van der Waals)	repulsão entre moléculas polares e apolares
origem da interação fraca (longo alcance)	repulsão Coulombiana entre os portadores introduzidos pelos dopantes	interação dipolar magnética	vínculos devido ao ponto de ligação covalente; incompressibil- idade	vínculos este- quiométricos introduzidos pelas moléculas anfifílicas do surfactante
fases típicas	listras; tabuleiro de xadrez	listras; bolhas	lamelar; esférica cúbica; cilíndrica hexagonal;	lamelar

Tabela 1.1. Principais características dos quatro sistemas discutidos nesta seção: significado físico do parâmetro de ordem $\phi(\vec{x})$, origem da interação forte de curto alcance, origem da interação fraca de longo alcance e fases mais comuns encontradas nestes sistemas.

em que A é a amplitude do parâmetro de ordem e \hat{n} é um versor paralelo à direção de modulação. Já a fase tipo bolhas e a fase cilíndrica hexagonal são expressas por:

$$\langle \phi_{\vec{q}} \rangle = \frac{A}{(2\pi)^d} \sum_{i=1}^3 \left[\delta \left(\vec{q} - q_0 \hat{n}_i \right) + \delta \left(\vec{q} + q_0 \hat{n}_i \right) \right]$$

$$\langle \phi \left(\vec{x} \right) \rangle = 2A \sum_{i=1}^3 \cos \left(q_0 \hat{n}_i \cdot \vec{x} \right) ,$$
 (1.10)

em que a condição adicional $\sum_{i=1}^{3} \hat{n}_i = 0$ deve ser satisfeita pelos versores. A tabela 1.1 apresenta as principais características dos quatro sistemas pormenorizados nesta seção, a saber: os óxidos de metais de transição dopados, os filmes finos magnéticos fortemente anisotrópicos, os copolímeros de dibloco e as microemulsões.

1.2. Transições de primeira ordem induzidas por flutuações

Tendo mostrado como a Hamiltoniana de Brazovskii surge naturalmente no contexto de uma variedade de sistemas com interações competitivas, podemos agora investigar as predições associadas a este modelo. Antes de enveredar por uma solução propriamente dita da Hamiltoniana, vamos abordar seus aspectos mais gerais de forma qualitativa. O modelo prevê a existência de uma fase ordenada modulada a baixas temperaturas. A principal pergunta que surge, então, é acerca do caráter da transição entre a fase desordenada (altas temperaturas) e esta fase modulada (baixas temperaturas).

A tentativa mais simples de se responder essa questão consiste em usar uma abordagem de campo médio, que, basicamente, equivale a substituir o parâmetro de ordem da Hamiltoniana (1.1) pelo seu valor médio na fase modulada. De uma maneira mais rigorosa, este método consiste em fazer uma aproximação de ponto de sela no cálculo da função de partição (1.2), tomando apenas a contribuição dominante do estado de menor energia $\langle \phi_0 \rangle$ no cômputo da integral funcional:

$$Z = e^{-\mathcal{H}[\langle \phi_0 \rangle]} \implies F = -\ln Z = \mathcal{H}[\langle \phi_0 \rangle] .$$
(1.11)

Por simplicidade, focaremos na fase de listras somente, descrita por (1.9). A substituição desta expressão na Hamiltoniana de Brazovskii fornece a seguinte energia livre:

$$F = \tau_0 A^2 + \frac{3u}{2} A^4 , \qquad (1.12)$$

em que assumimos o parâmetro u positivo e o parâmetro τ_0 proporcional a uma certa temperatura reduzida $\tau_0 \propto \frac{T-T_c}{T_c}$, de modo que ele possa mudar de sinal ao se variar a temperatura do sistema. A energia assume seus valores extremos para as seguintes amplitudes A:

$$\frac{dF}{dA} = 0 \implies \begin{cases} A_0 = 0\\ A_{\pm} = \pm \sqrt{-\frac{\tau_0}{3u}} \end{cases}$$
(1.13)

Para determinar a natureza dos pontos extremos, calculamos a derivada segunda, obtendo:

$$\frac{d^2 F}{dA^2} = \begin{cases} 2\tau_0 & \text{para } A = 0\\ -4\tau_0 & \text{para } A = A_{\pm} \end{cases}$$
(1.14)

Portanto, tem-se o seguinte cenário: para $\tau_0 > 0$, correspondente a $T > T_c$, o único ponto extremo que existe é $A_0 = 0$, que é o mínimo global da energia livre. Ou seja, o estado desordenado $\langle \phi \rangle = 0$ é o mais estável. Contudo, para $\tau_0 < 0$, correspondente a $T < T_c$, o estado desordenado não é mais um mínimo global, mas um máximo local. O mínimo global da energia livre é degenerado e ocorre para os valores simétricos $A_{\pm} = \pm \sqrt{-\frac{\tau_0}{3u}}$, correspondendo a uma fase ordenada modulada². Exatamente no ponto $\tau_0 = 0$, que corresponde à temperatura $T = T_c$, a energia dos dois estados é a mesma e a amplitude da fase modulada assume o mesmo valor que o correspondente à fase desordenada, ou seja, $A_{\pm} = 0$. Portanto, T_c é a temperatura de transição do sistema. Além disso, como o módulo do parâmetro de ordem varia continuamente na transição de fase, trata-se de uma transição de segunda ordem. A figura 1.4 apresenta a

 $^{^2}$ O sinal negativo é irrelevante dado o caráter oscilatório da função cosseno em (1.9).



Figura 1.4. Evolução do perfil da energia livre F (1.12), apresentada em função da amplitude do parâmetro de ordem A, com a diminuição da temperatura do sistema. A seqüência corresponde a: $T > T_c$ (gráfico superior à esquerda), $T = T_c$ (gráfico superior à direita) e $T < T_c$ (gráfico inferior).

evolução do perfil da energia livre ao se diminuir a temperatura do sistema, enquanto a figura 1.5 mostra como a amplitude do parâmetro de ordem varia com a temperatura.

Portanto, a abordagem de campo médio prevê uma transição de segunda ordem entre a fase desordenada e a fase modulada. Neste ponto, vale falar um pouco mais sobre transições de segunda ordem: a mais importante propriedade delas reside no caráter universal dos seis expoentes críticos que a caracterizam, definidos abaixo (omitimos o subscrito da temperatura reduzida τ_0 para simplificar a notação):



Figura 1.5. Módulo da amplitude do parâmetro de ordem A em função da temperatura reduzida τ_0 previsto pela energia livre de campo médio (1.12). Uma transição de segunda ordem ocorre para $\tau_0 = 0$, correspondente a $T = T_c$.

$$\begin{split} \xi\left(\tau,h=0\right) &\sim \tau^{-\nu} \qquad \phi\left(\tau,h=0\right) \sim |\tau|^{\beta} \qquad \phi\left(\tau=0,h\right) \sim h^{1/\delta} \\ \chi\left(\tau,h=0\right) &\sim \tau^{-\gamma} \qquad C\left(\tau,h=0\right) \sim \tau^{-\alpha} \qquad \chi\left(x\to\infty,\tau=0\right) \sim x^{2-d-\eta} \,. \end{split} \tag{1.15}$$

Nestas relações, h é o campo conjugado, ξ é o comprimento de correlação, χ é a susceptibilidade, C é o calor específico e d é a dimensionalidade do sistema. Estes expoentes não são independentes, pois estão relacionados por quatro relações de escala:

$$\alpha = 2 - d\nu$$

$$\beta (1 + \delta) = 2 - \alpha$$

$$2\beta\delta - \gamma = 2 - \alpha$$

$$\gamma = \nu (2 - \eta) .$$
(1.16)

A teoria do Grupo de Renormalização elucida o caráter universal desses expoentes, mostrando que eles não dependem dos detalhes microscópicos do sistema, mas apenas de sua dimensionalidade e do número de componentes do parâmetro de ordem. O embasamento físico desta poderosa técnica, em poucas palavras, reside na existência de uma escala de comprimento do sistema que se torna invariante no ponto crítico: o comprimento de correlação divergente $\xi \to \infty$ (para mais detalhes, ver [29], por exemplo).

A abordagem de campo médio utilizada claramente despreza as flutuações do parâmetro de ordem $\delta \phi = \phi - \langle \phi \rangle$ ao tomar apenas a contribuição do valor médio para o cômputo da função de partição em (1.11). De maneira geral, existem inúmeros métodos para se levar em conta a influência dessas flutuações. Por exemplo, no caso do modelo ϕ^4 (1.3), podem-se usar as técnicas do Grupo de Renormalização para demonstrar que, apesar de o caráter da transição permanecer de segunda ordem, os expoentes críticos sofrem alterações em relação aos valores obtidos por campo médio quando a dimensão do sistema é menor que quatro (ver, por exemplo, [30]).

Contudo, no modelo de Brazovskii (1.1) o espectro de flutuações é bastante diferente daquele do modelo ϕ^4 : enquanto neste último as excitações de mais baixa energia se dão apenas em torno do ponto q = 0 no espaço de momentos, no primeiro elas ocorrem em torno da hiper-esfera $q = q_0$, como esquematizado na figura 1.3 anterior. Assim, há relativamente mais modos de excitação no modelo de Brazovskii, indicando que sua influência deve ser muito mais dramática do que no caso do modelo ϕ^4 . A apresentação de métodos sistemáticos capazes de levar em conta estas flutuações se dará na próxima seção. Por ora, vamos nos limitar a uma discussão mais qualitativa acerca dos resultados obtidos após a inclusão dessas flutuações no cálculo da energia livre (1.12). Através de um método de campo médio auto-consistente pode-se mostrar que a energia livre assume a seguinte forma perturbativa em potências da amplitude A [31]:

$$F = \tau_R A^2 + \frac{u_R}{4} A^4 + \frac{w_R}{36} A^6 , \qquad (1.17)$$

em que τ_R , u_R e w_R são parâmetros renormalizados pelas flutuações do parâmetro de ordem, os quais serão calculados na próxima seção. Por ora, apresentamos sua dependência com a



Figura 1.6. Parâmetros τ_R , u_R e w_R da energia livre (1.17) renormalizados pela presença das flutuações do parâmetro de ordem em função da temperatura reduzida τ_0 .

temperatura reduzida τ_0 na figura 1.6. Enquanto $\tau_R > 0$ e $w_R > 0$ para qualquer temperatura, o parâmetro u_R muda de sinal para uma temperatura T^* ligeiramente abaixo de T_c , permanecendo negativo para $T < T^*$. Esta mudança de sinal torna necessária a inclusão do termo de ordem A^6 na expressão da energia livre, já que ela deve ser sempre uma função limitada inferiormente. Vale salientar que uma equação idêntica é obtida através de uma expansão do potencial termodinâmico ao invés da energia livre, conforme delineado em [32].

Vamos agora investigar as previsões sobre o caráter da transição de fase segundo a energia livre corrigida pelas flutuações (1.17), comparando com os resultados obtidos anteriormente na abordagem de campo médio. Os extremos de F ocorrem para:

$$A_{0} = 0$$

$$A_{\pm}^{(1)} = \pm \left(\frac{-3u_{R} + 3\sqrt{u_{R}^{2} - \frac{4}{3}w_{R}\tau_{R}}}{w_{R}}\right)^{1/2}$$

$$A_{\pm}^{(2)} = \pm \left(\frac{-3u_{R} - 3\sqrt{u_{R}^{2} - \frac{4}{3}w_{R}\tau_{R}}}{w_{R}}\right)^{1/2}.$$
(1.18)

Calculando a derivada segunda obtemos:

$$\left. \frac{d^2 F}{dA^2} \right|_{A=A_0} = \tau_R > 0 \quad , \left. \frac{d^2 F}{dA^2} \right|_{A=A_{\pm}^{(1)}} > 0 \quad , \left. \frac{d^2 F}{dA^2} \right|_{A=A_{\pm}^{(2)}} < 0 \,. \tag{1.19}$$



Figura 1.7. Evolução do perfil da energia livre F (1.17), apresentada em função da amplitude do parâmetro de ordem A, com a diminuição da temperatura do sistema. A seqüência corresponde a: $T > T_{esp}$ (gráfico superior à esquerda), $T_{trans} < T < T_{esp}$ (gráfico superior à direita), $T = T_{trans}$ (gráfico inferior à esquerda) e $T < T_{trans}$ (gráfico inferior à direita).

Assim, os pontos $A = A_{\pm}^{(2)}$ correspondem a máximos locais e não estão associados, portanto, a estados estáveis do sistema. Como $\tau_R > 0$ para qualquer temperatura, a fase desordenada A = 0 corresponde a um mínimo da energia livre sempre. Entretanto, isto não significa que este seja o mínimo global. Abaixo da temperatura correspondente à condição $\tau_R = \frac{3u_R^2}{4w_R}$, a qual denotaremos por T_{esp} , a fase modulada cujo parâmetro de ordem tem amplitude $A = A_{\pm}^{(1)}$ passa a ser também um mínimo da energia livre. Portanto, para $T \leq T_{esp}$, o sistema possui três mínimos locais: um em A = 0 (fase desordenada) e outro duplamente degenerado em $A = A_{\pm}^{(1)}$ (fase modulada). Para determinar qual deles é o mínimo global, basta encontrar a temperatura T_{trans} para a qual:

$$F\left(A_{\pm}^{(1)}\right) = F(0)$$
 . (1.20)

Substituindo as expressões (1.18), obtemos que a temperatura T_{trans} equivale à condição $\tau_R = \frac{9u_R^2}{16w_R}$. Desse modo, para $T > T_{trans}$, o mínimo global da energia livre corresponde à fase desordenada A = 0, enquanto para $T < T_{trans}$ ele corresponde à fase ordenada $A = A_{\pm}^{(1)}$. A figura 1.7 apresenta a evolução do perfil da energia livre com a diminuição da temperatura do sistema.

A partir destes resultados, podemos compor o seguinte cenário: para $T > T_{esp}$, a única fase estável do sistema é a desordenada. Para $T_{trans} < T < T_{esp}$, há duas fases em coexistência, sendo que a desordenada permanece sendo a de menor energia. Neste intervalo de temperaturas, diz-se que o estado modulado é uma fase metaestável do sistema, e a temperatura referente ao



Figura 1.8. Módulo da amplitude do parâmetro de ordem A em função da temperatura reduzida τ_0 , previsto pela energia livre renormalizada pelas flutuações (1.17). Uma transição de primeira ordem ocorre para $T = T_{trans}$ quando a temperatura é variada adiabaticamente.

limite de metaestabilidade T_{esp} é denominada de espinodal. Para $T < T_{trans}$, a fase estável é a modulada, enquanto o estado desordenado passa a ser uma fase metaestável. Caso a temperatura do sistema seja diminuída adiabaticamente, a transição da fase desordenada para a ordenada dar-se-á em $T = T_{trans}$, razão pela qual ela é denominada temperatura de transição. Como $A_{\pm}^{(1)} \neq 0$ para qualquer temperatura, inclusive T_{trans} , a transição de fase é acompanhada por uma descontinuidade na amplitude do parâmetro de ordem, como mostrado na figura 1.8. Assim, trata-se de uma transição de primeira ordem. É importante notar que, neste caso particular, não há uma temperatura espinodal para a fase desordenada, ou seja, ela é sempre metaestável. Na prática, efeitos dinâmicos de nucleação não incluídos nesta abordagem determinam uma temperatura a partir do qual o estado desordenado não é mais acessível [32].

Ao contrário das transições de segunda ordem, as de primeira ordem não apresentam características universais. Entretanto, algumas propriedades gerais são comuns a todas elas. Conforme explicado anteriormente, a não ser que a temperatura do sistema seja variada adiabaticamente, não é possível se determinar uma temperatura de transição bem definida, devido à presença de um intervalo de temperaturas no qual há coexistência de fases. Este fenômeno dá origem a interessantes efeitos de não-equilíbrio do sistema, o mais notável deles sendo a histerese, que será abordada com mais detalhes na seção 2.6.

Portanto, notamos que a transição de segunda ordem prevista pela abordagem de campo médio aplicada ao modelo de Brazovskii é frustrada pelas flutuações do parâmetro de ordem, dando origem a uma transição de primeira ordem. Neste caso, diz-se que esta transição de primeira ordem é induzida por flutuações [33]. Além dos sistemas descritos pelo modelo de Brazovskii, outros sistemas também sofrem uma transição de primeira ordem induzida por flutuações, mas através de mecanismos distintos do que o apresentado aqui. Exemplos de tais sistemas são estruturas antiferromagnéticas do tipo I ou do tipo II, em que o mecanismo da transição está associado ao elevado número de componentes do parâmetro de ordem, e cristais líquidos que sofrem a transição da fase nemática para a fase esmética-A, em que o parâmetro de ordem se acopla a um campo de *gauge* flutuante (ver referências em [33]).

1.3. Solução de campo médio auto-consistente do modelo de Brazovskii

Conforme explicado na seção anterior, as flutuações do parâmetro de ordem do modelo de Brazovskii induzem uma transição de primeira ordem entre a fase desordenada e a fase de listras. Nesta seção, vamos apresentar um método analítico que, apesar de relativamente simples, é capaz de fornecer resultados satisfatórios acerca da temperatura espinodal do estado ordenado, da temperatura de transição e do diagrama de fases referente à Hamiltoniana (1.1).

Uma grandeza fundamental na análise do comportamento crítico de um sistema é a função de correlação conectada:

$$G(\vec{x}, \vec{x}') = \langle (\phi(\vec{x}) - \langle \phi(\vec{x}) \rangle) (\phi(\vec{x}') - \langle \phi(\vec{x}') \rangle) \rangle$$

$$G(\vec{x}, \vec{x}') = \langle \phi(\vec{x}) \phi(\vec{x}') \rangle - \langle \phi(\vec{x}) \rangle \langle \phi(\vec{x}') \rangle , \qquad (1.21)$$

a qual mede o grau de correlação entre as flutuações do parâmetro de ordem em dois pontos $\vec{x} \in \vec{x}$. Em um sistema com simetria por translações espaciais, esta função depende apenas da distância relativa $|\vec{x} - \vec{x}'|$ entre estes pontos. Usando os conceitos básicos de Física Estatística (ver, por exemplo, [9]), mostra-se que, para uma Hamiltoniana qualquer $\mathcal{H}[\phi]$, esta grandeza pode ser obtida introduzindo-se um campo conjugado auxiliar $h(\vec{x})$:

$$\mathcal{H}'\left[\phi\right] = \mathcal{H}\left[\phi\right] - \int h\left(\vec{x}\right)\phi\left(\vec{x}\right)d^{d}x\,,\tag{1.22}$$

e tomando-se a seguinte derivada funcional da função de partição (1.2):

$$G\left(\vec{x}, \vec{x}'\right) = \left. \frac{\delta^2 \ln Z'}{\delta h\left(\vec{x}\right) \delta h\left(\vec{x}'\right)} \right|_{h\left(\vec{x}\right)=0},\tag{1.23}$$

em que Z' refere-se à Hamiltoniana \mathcal{H}' que contém o campo conjugado [9]. Para o caso em que a Hamiltoniana é quadrática no parâmetro de ordem:

$$\mathcal{H}\left[\phi\right] = \frac{1}{2} \int d^d x d^d x' \phi\left(\vec{x}\right) A\left(\vec{x}, \vec{x}'\right) \phi\left(\vec{x}'\right) \,, \tag{1.24}$$

os cálculos podem ser efetuados diretamente através de integrais funcionais gaussianas, fornecendo o seguinte resultado:

$$G(\vec{x}, \vec{x}') = A^{-1}(\vec{x}, \vec{x}') .$$
(1.25)

Entretanto, em geral, existem termos quárticos na Hamiltoniana que impedem um cálculo analítico da função de correlação, exigindo a aplicação de métodos perturbativos. Dentre eles, encontram-se expansões em 1/N (em que N denota o número de componentes do parâmetro de ordem), métodos que usam as técnicas do Grupo de Renormalização e abordagens de campo médio auto-consistentes. No que concerne o modelo de Brazovskii, usaremos este último método - também denominado de método de Hartree - durante todo o restante do trabalho, uma vez que ele não só é mais simples que os demais, como também fornece resultados bastante satisfatórios
quando comparado com simulações numéricas [34, 35]. Conforme explicado anteriormente, ele foi delineado primeiramente por Brazovskii em [8].

Inicialmente, reescrevemos a Hamiltoniana de Brazovskii (1.1) da seguinte forma:

$$\mathcal{H}[\phi] = \frac{1}{2} \int d^d x d^d x' \phi\left(\vec{x}\right) G_0^{-1}\left(\vec{x}, \vec{x}'\right) \phi\left(\vec{x}'\right) + \frac{u}{4} \int d^d x \phi^4\left(\vec{x}\right) \,, \tag{1.26}$$

em que $G_0(\vec{x}, \vec{x}')$ denota a função de correlação "nua" (isto é, sem levar em conta o termo quártico):

$$G_0^{-1}(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d q G_0^{-1}(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}$$

$$G_0(\vec{q}) = \frac{1}{\tau_0 + (q-q_0)^2}.$$
(1.27)

Agora, escrevemos o parâmetro de ordem da seguinte forma:

$$\phi\left(\vec{x}\right) = \left\langle\phi\left(\vec{x}\right)\right\rangle + \psi\left(\vec{x}\right)\,,\tag{1.28}$$

em que $\psi(\vec{x}) = \phi(\vec{x}) - \langle \phi(\vec{x}) \rangle$ denota a flutuação do parâmetro de ordem, e, portanto, possui valor médio nulo $\langle \psi(\vec{x}) \rangle = 0$. Desse modo, fica evidente que a função de correlação também pode ser escrita como $G(\vec{x}, \vec{x}') = \langle \psi(\vec{x}) \psi(\vec{x}') \rangle$. Substituindo (1.28) em (1.26), obtemos:

$$\mathcal{H}[\phi] = \mathcal{H}[\psi] + \frac{1}{2} \int d^d x d^d x' \langle \phi(\vec{x}) \rangle G_0^{-1}(\vec{x}, \vec{x}') \langle \phi(\vec{x}') \rangle + \int d^d x d^d x' \langle \phi(\vec{x}) \rangle G_0^{-1}(\vec{x}, \vec{x}') \psi(\vec{x}') + \frac{u}{4} \int d^d x \langle \phi(\vec{x}) \rangle^4 + u \int d^d x \langle \phi(\vec{x}) \rangle^3 \psi(\vec{x}) + \frac{3u}{2} \int d^d x \langle \phi(\vec{x}) \rangle^2 \psi^2(\vec{x}) + u \int d^d x \langle \phi(\vec{x}) \rangle \psi^3(\vec{x}) .$$
(1.29)

Retendo apenas os termos que contenham potências pares do campo de flutuação $\psi\left(\vec{x}\right)$ chegamos a:

$$\mathcal{H}[\psi, \langle \phi \rangle] = \frac{1}{2} \int d^d x d^d x' \psi(\vec{x}) G_0^{-1}(\vec{x}, \vec{x}') \psi(\vec{x}') + \frac{u}{4} \int d^d x \psi^4(\vec{x}) + \frac{3u}{2} \int d^d x \left\langle \phi(\vec{x}) \right\rangle^2 \psi^2(\vec{x}) .$$
(1.30)

O termo linear de (1.29) foi desprezado pois $\langle \psi(\vec{x}) \rangle = 0$. Já a justificativa para se desprezar o termo cúbico desta mesma expressão reside no fato de o vértice cúbico $\langle \psi \psi \psi \rangle$ ser pequeno comparado ao vértice quadrático $\langle \psi \psi \rangle$, o qual fornece a função de correlação, que é nossa grandeza de interesse.

No método auto-consistente de Hartree, transforma-se o termo quártico de (1.30), ψ^4 , no produto $\psi^2 \langle \psi^2 \rangle$, obtendo assim uma Hamiltoniana quadrática nos campos ψ . Como existem seis maneiras diferentes de se realizar esta contração, obtemos:

$$\mathcal{H}[\psi,\langle\phi\rangle] = \frac{1}{2} \int d^d x d^d x' \psi\left(\vec{x}\right) \left[G_0^{-1}\left(\vec{x},\vec{x}'\right) + 3u\left\langle\psi^2\left(\vec{x}\right)\right\rangle\delta\left(\vec{x}-\vec{x}'\right) + 3u\left\langle\phi\left(\vec{x}\right)\right\rangle^2\delta\left(\vec{x}-\vec{x}'\right)\right]\psi\left(\vec{x}'\right) ,$$
(1.31)

e, assim, chegamos à seguinte equação auto-consistente para a função de correlação:

$$G^{-1}(\vec{x}, \vec{x}') = G_0^{-1}(\vec{x}, \vec{x}') + 3uG(\vec{x}, \vec{x})\,\delta(\vec{x} - \vec{x}') + 3u\langle\phi(\vec{x})\rangle^2\,\delta(\vec{x} - \vec{x}') \,. \tag{1.32}$$

Passando para o espaço de Fourier, é possível mostrar que os elementos de matriz da função de correlação dominantes são os diagonais. Assim, a equação auto-consistente assume a forma:

$$G_{\vec{q}}^{-1} = \left(G_{0}^{-1}\right)_{\vec{q}} + 3u \left\langle G\left(\vec{x}, \vec{x}\right) \right\rangle + 3u \sum_{\vec{p}} \left\langle \phi \right\rangle_{\vec{p}} \left\langle \phi \right\rangle_{-\vec{p}}, \qquad (1.33)$$

em que passamos para o limite do discreto $(2\pi)^d \,\delta\,(\vec{p}-\vec{p}') \to \delta_{\vec{p},\vec{p}'}$ e definimos:

$$\langle G\left(\vec{x},\vec{x}\right)\rangle = \frac{1}{\left(2\pi\right)^d} \int d^d p G_{\vec{p}} \,. \tag{1.34}$$

Esta é a abordagem de campo médio auto-consistente aplicada ao modelo de Brazovskii. Comparando-a com as expansões perturbativas diagramáticas usualmente empregadas em sistemas quânticos de muitos corpos, ela é análoga ao método RPA (random phase approximation) [36]. Através da Hamiltoniana (1.29), podemos ainda encontrar a equação de estado, que relaciona o campo conjugado $h(\vec{x})$ com o parâmetro de ordem $\phi(\vec{x})$. Aplicando a definição [9]:

$$h\left(\vec{x}\right) = \left\langle \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta\left\langle \phi\left(\vec{x}\right)\right\rangle} \right\rangle \,, \tag{1.35}$$

obtemos a seguinte expressão, após empregar as mesmas aproximações de antes:

$$h(\vec{x}) = \int d^{d}x' G_{0}^{-1}(\vec{x}, \vec{x}') \langle \phi(\vec{x}') \rangle + u \langle \phi(\vec{x}) \rangle^{3} + 3u \langle \phi(\vec{x}) \rangle G(\vec{x}, \vec{x}) .$$
(1.36)

Para simplificar os cálculos subseqüentes, podemos passar a equação de estado para o espaço de Fourier. Combinando com a equação auto-consistente (1.33), obtemos:

$$h_{\vec{q}} = G_{\vec{q}}^{-1} \langle \phi \rangle_{\vec{q}} + u \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2} \langle \phi \rangle_{\vec{p}_1} \langle \phi \rangle_{\vec{p}_2} \langle \phi \rangle_{\vec{q} - \vec{p}_1 - \vec{p}_2} - 3u \sum_{\vec{p}} \langle \phi \rangle_{\vec{p}} \langle \phi \rangle_{-\vec{p}} \langle \phi \rangle_{\vec{q}} .$$
(1.37)

As equações (1.33) e (1.37) são o principal resultado deste método auto-consistente. Para avançar, é necessário assumir alguma forma específica para a função de correlação. Tomando como base a expressão "nua" (1.27), propõe-se a seguinte forma:

$$G(\vec{q}) = \frac{1}{\tau + (q - q_0)^2}, \qquad (1.38)$$

em que τ é um parâmetro renormalizado a ser encontrado pela solução auto-consistente. Podemos justificar o emprego desta forma sempre que os módulos dos momentos das flutuações forem próximos de q_0 , isto é, sempre que o sistema estiver próximo da transição de fase. Vamos



Figura 1.9. Função de correlação no espaço real G, dada pelo equação (1.39), em função da distância entre os pontos r medida em unidades de q_0^{-1} . A curva sólida refere-se a um comprimento de correlação $\xi = 10$, enquanto a curva pontilhada refere-se a $\xi = 3$ (em unidades de q_0^{-1}). Vê-se que, para $r > \xi$, as correlações são bastante suprimidas.

explorar o significado físico do parâmetro τ . Calculando a transformada de Fourier inversa de (1.38) para um sistema tridimensional, obtemos a função de correlação no espaço real:

$$G(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{4\pi^2}{r} e^{-r/\xi} \left[\cos\left(q_0 r\right) + (q_0 \xi) \sin\left(q_0 r\right) \right], \qquad (1.39)$$

em que $r = |\vec{x} - \vec{x}'|$ e $\xi = \tau^{-1/2}$. A figura 1.9 apresenta o comportamento desta função para dois valores diferentes de ξ , indicando que para dois pontos separados por $r > \xi$, a correlação entre as flutuações cai drasticamente. Este fato é devido à existência do fator $e^{-r/\xi}$ na expressão da função de correlação, o que não é uma propriedade particular apenas do sistema tridimensional, mas ocorre para qualquer dimensionalidade. Logo, pode-se associar ξ à distância a partir da qual dois pontos do sistema praticamente deixam de estar correlacionados, razão pela qual a quantidade $\xi = \tau^{-1/2}$ é chamada de comprimento de correlação do sistema.

Substituindo (1.38) em (1.34), podemos efetuar analiticamente a integral que determina $\langle G(\vec{x}, \vec{x}) \rangle$, notando que a função de correlação depende apenas do módulo do vetor de onda e possui um pico bastante pronunciado em $q = q_0$. Logo, o intervalo de integração pode ser restrito a $q_0 - \Lambda < q < q_0 + \Lambda$, em que Λ é o *cutoff* ultravioleta no espaço de momentos. O *cutoff* está relacionado à estrutura cristalina microscópica do sistema, e, conseqüentemente, à existência de uma distância mínima entre dois elementos da rede. Para uma rede com simetria cúbica, tem-se $\Lambda = 2\pi/a$, em que a é o parâmetro de rede. Voltando à integral (1.34), temos:

$$\langle G(\vec{x}, \vec{x}) \rangle = \frac{S_d}{(2\pi)^d} \int_{q_0 - \Lambda}^{q_0 + \Lambda} \frac{q_0^{d-1} dq}{\tau + (q - q_0)^2},$$
 (1.40)

em que S_d é a área da hiper-esfera unitária em d dimensões. Aplicando a mudança de variáveis $v = (q - q_0) / \sqrt{\tau}$ e considerando o limite de $\xi \gg a$, obtemos:

$$\langle G(\vec{x}, \vec{x}) \rangle = \frac{\pi q_0^{d-1} S_d}{(2\pi)^d \sqrt{\tau}}.$$
 (1.41)

Assim, a equação auto-consistente (1.33) fica:

$$\tau = \tau_0 + \frac{u\Gamma_d}{\sqrt{\tau}} + 3u \sum_{\vec{p}} \langle \phi \rangle_{\vec{p}} \langle \phi \rangle_{-\vec{p}} , \qquad (1.42)$$

em que definimos:

$$\Gamma_d = \frac{3\pi q_0^{d-1} S_d}{(2\pi)^d} = \frac{6\pi^{\frac{d+2}{2}} q_0^{d-1}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right) (2\pi)^d} \,. \tag{1.43}$$

Consideramos, agora, dois estados específicos: a fase desordenada, descrita por $\langle \phi \rangle = 0$, e a fase de listras, descrita por $\langle \phi(\vec{x}) \rangle = 2A \cos{(\vec{q_0} \cdot \vec{x})}$. Para a primeira, a equação auto-consistente fica:

$$\tau = \tau_0 + \frac{u\Gamma_d}{\sqrt{\tau}} \,, \tag{1.44}$$

enquanto para a segunda ela é escrita como:

$$\tau_A = \tau_0 + \frac{u\Gamma_d}{\sqrt{\tau_A}} + 6uA^2.$$
(1.45)

A amplitude do parâmetro de ordem A é encontrada através da equação de estado (1.37). Para a fase de listras, ela assume a forma:

$$h = A \left(\tau_A - 3uA^2 \right) \,. \tag{1.46}$$

Pela própria definição (1.35), para que a fase de listras seja um estado de equilíbrio, é necessário que h = 0. Portanto, usando (1.46), chegamos à condição:

$$A^2 = \frac{\tau_A}{3u} \,. \tag{1.47}$$

A combinação de parâmetros que aparece nas equações auto-consistentes sugere o uso de uma temperatura de referência $\bar{\tau} = (u\Gamma_d)^{2/3}$, de modo que podemos definir as variáveis adimensionais:

$$\rho_{(A,0)} \equiv \frac{\tau_{(A,0)}}{\left(u\Gamma_d\right)^{2/3}} = \frac{\tau_{(A,0)}}{\bar{\tau}} \,. \tag{1.48}$$

Substituindo a expressão da amplitude (1.47) em (1.45) e fazendo a mudança de variáveis acima, encontramos as equações auto-consistentes:

$$\rho = \rho_0 + \frac{1}{\sqrt{\rho}} \tag{1.49}$$

$$-\rho_A = \rho_0 + \frac{1}{\sqrt{\rho_A}} \,. \tag{1.50}$$

As soluções destas equações são apresentadas na figura 1.10. Nota-se que, enquanto a equação referente à fase desordenada (1.49) possui solução para qualquer valor de ρ_0 - e portanto para qualquer temperatura do sistema - o mesmo não acontece para a equação referente à fase de listras (1.50): ela só possui uma solução real para $\rho_0 \lesssim -1,89$. Assim, voltando às variáveis originais, identificamos a temperatura espinodal da fase ordenada $\tau_0^{(esp)} \approx -1,89 (u\Gamma_d)^{2/3}$: somente para temperaturas abaixo dela é que a fase de listras é um estado metaestável do sistema. Já a fase desordenada é sempre um estado pelo menos metaestável, para qualquer

24



Figura 1.10. Solução ρ da equação auto-consistente referente à fase desordenada (1.49) - gráfico à esquerda - e solução ρ_A da equação auto-consistente referente à fase de listras (1.50) - gráfico à direita - em função de ρ_0 . Nota-se que nenhuma das soluções assume o valor nulo, indicando que o comprimento de correlação não diverge e a transição é de primeira ordem.

temperatura. Das soluções de (1.49) e (1.50), verifica-se também que nem ρ nem ρ_A podem se anular. Deste modo, como o comprimento de correlação é dado por $\xi = \tau^{-1/2}$, concluímos que ele nunca diverge, de modo que a transição entre a fase desordenada e a fase de listras é de primeira ordem.

Resta ainda descobrir qual dos dois estados metaestáveis do sistema encontrados na região de coexistência é o de menor energia. Para isso, pode-se calcular a diferença de energia entre as fases ordenada e desordenada, usando o seguinte artifício: assumimos a existência de uma campo externo conjugado h. Consideramos que ele começa nulo quando o sistema está na fase desordenada (ou seja, A = 0), aumenta de valor e volta a ser zero no mínimo de energia livre correspondente à fase de listras - ou seja, $A \neq 0$ e dado pela equação (1.47). Dessa maneira, a diferença de energia livre ΔF entre o estado de listras e o estado desordenado pode ser calculada por:

$$\Delta F = \int_0^A \frac{\partial F}{\partial A'} dA' \,. \tag{1.51}$$

Agora, usando que:

$$\frac{\partial F}{\partial A} = \frac{\delta F}{\delta \langle \phi \rangle} \frac{\delta \langle \phi \rangle}{\delta A} = 2h \,, \tag{1.52}$$

chegamos a:

$$\Delta F = \int_0^A 2h dA' = 2 \int_{\tau}^{\tau_A} h\left(\tau'\right) \frac{dA}{d\tau'} d\tau' , \qquad (1.53)$$

em que as formas explícitas das funções $h(\tau')$ e $A(\tau')$ são dadas pelas expressões (1.46) e (1.47). Após um cálculo direto, obtém-se a seguinte fórmula para a diferença de energia, escrita em termos das variáveis adimensionais (1.48):

$$\Delta F = \frac{\left(u\Gamma_d^4\right)^{1/3}}{6} \left[-\frac{\rho_A^2}{2} - \frac{\rho^2}{2} - \sqrt{\rho} + \sqrt{\rho_A} \right].$$
(1.54)

O comportamento da diferença de energia em função de ho_0 , que é proporcional à temperatura



Figura 1.11. Diferença de energia livre entre a fase desordenada e a fase de listras ΔF em função de $\rho_0 \propto \frac{T-T_c}{T_c}$. O estado ordenado tem menor energia a partir de $\rho_0 \approx -2,03$.



Figura 1.12. Comprimento de correlação ξ do sistema (em unidades do seu valor ξ^* na temperatura de transição) em função da temperatura reduzida τ_0 (em unidade do módulo da temperatura de transição $|\tau_0^*|$). Observa-se que, na temperatura de transição, ocorre uma descontinuidade finita, típica de transições de primeira ordem.

reduzida, está mostrado na figura 1.11. Vê-se que, para $\rho_0 \lesssim -2,03$, a fase de listras possui energia menor que a fase desordenada. Logo, identificamos a temperatura de transição do sistema $\tau_0^* \approx -2,03 (u\Gamma_d)^{2/3}$. De posse deste valor e das equações auto-consistentes (1.49) e (1.50), apresentamos na figura 1.12 o comportamento do comprimento de correlação em função da temperatura. Nota-se a presença de um salto finito na temperatura de transição, característico de uma transição de primeira ordem³.

É possível ainda realizar uma expansão da diferença de energia livre ΔF em potências da amplitude do parâmetro de ordem A usando a equação auto-consistente (1.45) [31]. O resultado obtido é exatamente o que foi apresentado na seção anterior durante a discussão da transição de primeira ordem induzida por flutuações, equação (1.17). Os parâmetros renormalizados τ_R , $u_R \in w_R$ apresentados na figura 1.6 daquela seção podem ser escritos em termos das variáveis adimensionais (1.48) como:

³ Salientamos, mais uma vez, que esta identificação de uma temperatura bem definida na qual ocorre a transição de primeira ordem só faz sentido se a variação de temperatura do sistema for adiabática.

1.3. Solução de campo médio auto-consistente do modelo de Brazovskii

$$\tau_{R} = \rho_{0} + \frac{1}{\sqrt{\rho}}$$

$$u_{R} = \frac{2\rho^{3/2} - 1}{2\rho^{3/2} + 1}$$

$$w_{R} = \frac{9}{2\rho^{5/2} \left(1 + \frac{1}{2\rho^{3/2}}\right)^{3}}.$$
(1.55)

Isto completa a análise da transição de Brazovskii segundo o método de campo médio auto-consistente. Seria possível considerar também transições entre o estado desordenado e outras fases mais complexas não-unidimensionais, como a fase de bolhas, por exemplo. O método é o mesmo e descobre-se que as fases mais complexas possuem energias maiores que a fase de listras [8]. Entretanto, elas podem ser acessadas aplicando-se campos externos ao sistema, o que muda drasticamente a Hamiltoniana original ao introduzir termos com potências ímpares do parâmetro de ordem (para uma abordagem de campo médio a esse problema, ver [6]). Esta proliferação de inúmeros estados modulados é bastante relevante conforme a temperatura do sistema diminui, indicando um perfil de energia livre rugoso, repleto de mínimos locais. Tal cenário sugere a possibilidade de surgir um estado vítreo para a Hamiltoniana de Brazovskii que não teria sua origem ligada a nenhuma desordem estrutural, mas seria auto-gerada (para mais detalhes sobre este tópico, ver [37, 25]).

Uma questão pertinente acerca do método auto-consistente é sobre o seu limite de validade. Ao contrário do modelo ϕ^4 , por exemplo, em que a dimensionalidade do sistema constitui um parâmetro perturbativo válido ($\epsilon = 4 - d$), o que determina a validade dos cálculos anteriores é a "magnitude" do termo quártico interagente, representada pelo parâmetro u. Há diferentes critérios possíveis para se estimar quando o método auto-consistente falha; de maneira geral, o que se faz é investigar quando os outros diagramas desprezados passam a ser importantes - por exemplo, o termo cúbico em (1.29). Os critérios variam de $u^{1/15} \ll 1$ a $u^{1/6} \ll 1$ [31], mas não entraremos nos detalhes destes cálculos, limitando-nos a assumir um parâmetro interagente u pequeno o suficiente.

Por fim, é importante mencionar um outro método perturbativo usado na análise do modelo de Brazovskii, baseado na aplicação do Grupo de Renormalização (GR) ao espaço de momentos⁴ (para mais detalhes, ver [31, 38, 39]). Conforme já apresentado na figura 1.3, as excitações de mais baixa energia da Hamiltoniana (1.1) possuem momentos q localizados ao redor da hiper-esfera de raio q_0 . Isto contrasta fortemente com o cenário das excitações do modelo ϕ^4 , por exemplo, cujos momentos estão ao redor de um ponto, e não de uma hiper-esfera especificamente, do ponto q = 0. Assim, a decimação dos modos de alta energia na casca de momentos usualmente realizada quando se aplica o GR em modelos do tipo ϕ^4 deve ser radicalmente alterada. Ao invés de serem eliminados os modos com momentos (Λ/b) $< q < \Lambda$, em que b é o parâmetro de decimação, é necessário eliminar os modos localizados em uma casca esférica de espessura Λ ao redor da esfera de raio q_0 , conforme esquematizado na figura 1.13. Como pode ser observado na mesma figura, após esta "granulação" do sistema, ele assume uma

⁴ Em inglês, momentum shell Renormalization Group approach.



Figura 1.13. Esquema geral do processo de decimação dos modos de alta energia no espaço de momentos da Hamiltoniana de Brazovskii. Apenas modos ao redor da superfície $q = q_0$ são eliminados. $\Lambda \ll q_0$ é o cutoff ultravioleta dos momentos e b é o parâmetro de decimação. Após a eliminação das flutuações de comprimentos de onda pequenos, o sistema assume uma configuração mais próxima daquela na região da transição de fase.

configuração mais próxima do arranjo perfeito de listras próximo à temperatura de transição. É importante salientar que uma abordagem similar do GR no espaço de momentos já havia sido proposta para estudar sistemas fermiônicos de muitos corpos, já que neste caso as excitações de mais baixa energia também ocorrem ao redor de uma superfície no espaço de momentos - a superfície de Fermi [40].

A utilização deste particular processo de decimação da casca de momentos gera efeitos bastante interessantes nos parâmetros da Hamiltoniana de Brazovskii (1.26). O parâmetro do termo quártico u, por exemplo, é renormalizado em dois parâmetros distintos $u_{\parallel} e \bar{u}$, dependendo da direção relativa entre os pares dos quatro momentos deste termo, $\vec{q_1}$, $\vec{q_2}$, $\vec{q_3} e \vec{q_4}$. Enquanto o sinal de \bar{u} permanece positivo durante todo o fluxo do GR, o sinal de u_{\parallel} fica negativo a partir de uma certa temperatura, indicando a ocorrência da transição de primeira ordem. Os resultados obtidos pela aplicação do GR ao modelo de Brazovskii são satisfatoriamente próximos dos valores obtidos pelo método de Hartree auto-consistente [31, 38], corroborando a utilidade e validade deste último.

1.4. Flutuações elásticas e o derretimento da fase modulada

Após termos determinado o diagrama de fases do modelo de Brazovskii, vamos investigar como ele é alterado quando são levados em conta outros tipos de flutuações do parâmetro de ordem distintos dos "modos de flutuação de densidade" explorados na seção anterior. Em particular, focaremos nos modos elásticos (fônons) e nas excitações topológicas do sistema. Neste quesito, a dimensionalidade do sistema desempenha um papel fundamental, uma vez que ela determina não só o grau de relevância das flutuações elásticas, como também os tipos de defeitos topológicos possíveis de serem encontrados. Portanto, durante esta seção, a discussão será particularizada para o caso de duas dimensões espaciais (x, y), seguindo, em grande parte, a abordagem de Toner e Nelson [11].



Figura 1.14. Fase de listras em duas dimensões modulada na direção \hat{x} e na presença de um campo de deformação elástica u(x, y).

Deformações elásticas da fase de listras podem ser descritas por um campo escalar u(x, y). Sem perda de generalidade, consideramos as listras moduladas ao longo da direção \hat{x} , conforme esquematizado na figura 1.14. Logo, na presença dessas deformações, as listras podem ser descritas por:

$$\phi(\vec{x}) = \phi_0 e^{iq_0[x+u(x,y)]}, \qquad (1.56)$$

em que, diferentemente das seções anteriores, tomamos apenas uma componente harmônica para simplificar os cálculos subseqüentes. A amplitude do parâmetro de ordem é denotada por ϕ_0 , e não por A, pois usaremos esta última notação apenas para a amplitude obtida da solução auto-consistente, equação (1.47). Em geral, os modos elásticos são menos energéticos que os modos de densidade, de modo que podemos fazer uma aproximação do tipo Born-Oppenheimer e considerar, em um primeiro momento, a amplitude ϕ_0 constante em relação às excitações térmicas dos fônons.

Para encontrarmos a Hamiltoniana harmônica que descreve o campo de deformação u, a qual denominaremos \mathcal{H}_{el} , substituímos a expressão (1.56) na parte quadrática da Hamiltoniana de Brazovskii (1.1), obtendo:

$$\mathcal{H}_{el}[u] = \frac{\phi_0^2}{8} \int d^2x \left\{ \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)^2 + q_0^2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \right]^2 + 4q_0^2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^3 + \frac{\partial u}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \right] + 4q_0^2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right\}.$$
(1.57)

Os termos dominantes são os de menor potência em u. Além disso, o termo de curvatura $\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)^2$ pode ser desprezado frente ao termo $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2$, de modo que a Hamiltoniana elástica harmônica assume a forma final:

$$\mathcal{H}_{el}[u] = \frac{1}{2}B \int d^2x \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \lambda^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)^2 \right], \qquad (1.58)$$

Capítulo 1. O Modelo de Brazovskii





Figura 1.15. Modos de deformação elástica descritos por (1.58): (a) o segundo termo, correspondente a curvaturas nas listras que mantêm suas larguras constantes e (b) o primeiro termo, correspondente a deformações volumétricas alterando a largura típica das listras. Adaptada de [11].

com os parâmetros:

$$B = \phi_0^2 q_0^2$$
 e $\lambda^2 = \frac{1}{4q_0^2}$. (1.59)

A interpretação de cada termo de \mathcal{H}_{el} pode ser feita diretamente com o auxílio da figura 1.14. Enquanto o primeiro termo corresponde a modos de flutuações da largura das listras, o segundo corresponde a modos de flutuações da curvatura delas; ambos estão esquematizados na figura 1.15. A ausência de um termo do tipo $\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2$ deve-se ao fato de não haver direções preferenciais para o alinhamento das listras, pois a função $\frac{\partial u}{\partial y}$ corresponde a rotações das listras em relação à direção \hat{y} , que é a direção na qual elas se propagam. Como não há direções preferenciais, o sistema não pode ganhar ou perder energia por rotacionar coerentemente as listras. Este cenário é completamente alterado na presença de campos cristalinos que definem direções de simetria; seus efeitos no diagrama de fases serão discutido mais adiante.

A Hamiltoniana (1.58) é equivalente à que descreve a elasticidade de cristais líquidos na fase esmética-A [4]. O paralelo se dá pelo fato de haver um ordenamento unidimensional tanto na fase esmética quanto na fase de listras. Assim, muitos dos resultados que serão delineados a seguir são de suma importância no âmbito da Física da Matéria Condensada Mole, o que estabelece mais uma interessante conexão entre esta área e a Física da Matéria Condensada Dura, onde inúmeras aplicações do modelo de Brazovskii são conhecidas. No contexto da teoria da elasticidade [41], diz-se que a Hamiltoniana (1.58) descreve um sistema sem cisalhamento (do inglês *shearless*), pois as deformações são apenas no "volume" das listras, e não na sua forma.

No espaço de Fourier, a Hamiltoniana elástica assume a forma:

$$\mathcal{H}_{el}[u] = \frac{B}{2(2\pi)^2} \int d^2 q u_{\vec{q}} \left(q_x^2 + \lambda^2 q_y^4 \right) u_{-\vec{q}}.$$
 (1.60)

Logo, como nesta aproximação foram retidos apenas os termos quadráticos em u, a função de correlação conectada \tilde{G} pode ser lida diretamente da expressão anterior:

$$\tilde{G}_{\vec{q}} = \frac{1}{B\left(q_x^2 + \lambda^2 q_y^4\right)}.$$
(1.61)

O estado que minimiza a energia (1.58) é o "uniforme" $\langle u \rangle = 0$, correspondendo à fase de listras sem nenhuma deformação elástica. Entretanto, as flutuações elásticas podem desempenhar um papel fundamental na ordem de longo alcance posicional do sistema. Para avaliarmos seus efeitos, consideramos a aproximação tipo Born-Oppenheimer mencionada anteriormente, em que os modos elásticos são independentes dos modos de densidade. O valor médio do parâmetro de ordem (1.56) fica:

$$\left\langle \phi \right\rangle = \left\langle \tilde{\phi} \right\rangle \left\langle e^{iq_0 u(\vec{x})} \right\rangle \,, \tag{1.62}$$

em que $\tilde{\phi}$ denota os modos de densidade, descritos pela Hamiltoniana de Brazovskii (1.1). A exponencial acima pode ser calculada usando-se a expansão em cumulantes; como $\langle u \rangle = 0$, temos:

$$\left\langle e^{iq_0u(\vec{x})} \right\rangle = e^{-\frac{q_0^2}{2} \left\langle u^2(\vec{x}) \right\rangle} = e^{-W}, \qquad (1.63)$$

em que W é denominado fator de Debye-Waller [9]. Ele pode ser calculado diretamente a partir da função de correlação (1.61):

$$W = \frac{q_0^2}{2} \left\langle u^2\left(\vec{x}\right) \right\rangle = \frac{q_0^2}{2} G\left(\vec{x}, \vec{x}\right) = \frac{q_0^2}{2\left(2\pi\right)^2} \int d^2 q G_{\vec{q}} = \frac{q_0^2}{8\pi^2 B} \int \frac{d^2 q}{q_x^2 + \lambda^2 q_y^4} \,. \tag{1.64}$$

Para duas dimensões, a integral pode ser efetuada com o auxílio do *cutoff* ultravioleta no espaço de momentos, Λ :

$$W = \frac{q_0^2}{2\pi^2 B} \int_0^{\Lambda} dq_y \int_0^{\Lambda} \frac{dq_x}{q_x^2 + \lambda^2 q_y^4}$$
$$W = \frac{q_0^2}{2\pi^2 B\lambda} \int_0^{\Lambda} \frac{dq_y}{q_y^2} \arctan\left(\frac{\Lambda}{\lambda q_y^2}\right).$$
(1.65)

Para o limite inferior de integração $q_y \rightarrow 0$, a função arco-tangente pode ser aproximada por $\pi/2$, de modo que:

$$W \sim \int_0^\Lambda \frac{dq_y}{q_y^2} = \left. \frac{1}{q_y} \right|_\Lambda^0 \to \infty \,. \tag{1.66}$$

Portanto, o fator de Debye-Waller diverge polinomialmente com o momento, de modo que $\langle \phi \rangle \sim e^{-W} \rightarrow 0$, significando que o sistema não apresenta uma fase ordenada para qualquer temperatura finita. Além disso, a ordem posicional da fase de listras deixa de ser de longo alcance a passa a ser de curto alcance apenas. Este resultado pode ser obtido através do cálculo da função de correlação não-conectada:

$$\langle \phi(\vec{x}) \phi(0) \rangle \sim \left\langle e^{iq_0[u(\vec{x}) - u(0)]} \right\rangle = \exp\left[-\frac{q_0^2}{2} \left\langle \left[u(\vec{x}) - u(0) \right]^2 \right\rangle \right],$$
 (1.67)

em que usamos novamente a expansão em cumulantes. O valor médio no expoente é dado pela expressão:

$$\frac{1}{2}\left\langle \left[u\left(\vec{x}\right) - u\left(0\right)\right]^{2} \right\rangle = \frac{1}{\left(2\pi\right)^{2}} \int d^{2}q G_{\vec{q}} \left(1 - e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}}\right) \,. \tag{1.68}$$

Após um longo cálculo, obtêm-se os resultados [11]:

$$\left\langle \phi\left(\vec{x}\right)\phi\left(0\right)\right\rangle = \exp\left[-\frac{q_{0}^{2}}{B}\left(\frac{|x|}{4\pi\lambda}\right)^{1/2}\right]\,,\tag{1.69}$$

para $\lambda x \gg y^2$ e

$$\langle \phi\left(\vec{x}\right)\phi\left(0\right)\rangle = \exp\left[-\frac{q_{0}^{2}}{4B\lambda}\left|y\right|\right],\tag{1.70}$$

para $\lambda x \ll y^2$. Portanto, a correlação posicional é de curto alcance. O primeiro limite, equação (1.69), corresponde aos modos de flutuações das larguras das listras, enquanto o segundo limite, equação (1.70), corresponde aos modos de flutuações da curvatura. Fica claro que a primeira função de correlação decai mais lentamente que a segunda, indicando que as flutuações da curvatura custam menos energia que as flutuações volumétricas. Logo, a conclusão é que a fase de listras é derretida pelas excitações elásticas em duas dimensões. No caso de três dimensões, a situação muda substancialmente: apesar de o fator de Debye-Waller ainda divergir, ele o faz logaritmicamente com o momento. Pode-se mostrar que, nesta situação, a ordem de longo alcance ainda é destruída, mas o sistema possui ordem de quase-longo alcance, isto é, as correlações (1.67) decaem polinomialmente com a separação entre os pontos, e não exponencialmente. Diz-se que três é a dimensão crítica inferior deste sistema composto pela fase de listras com deformações elásticas; abaixo desta dimensão, não se encontra nenhum tipo de ordem posicional no sistema.

Apesar de as listras em duas dimensões não possuírem ordem translacional, a ordem orientacional ainda persiste. Definimos a orientação das listras através de um diretor \vec{N} paralelo à direção de modulação \hat{x} . É importante salientar que trata-se de um diretor, e não de um vetor propriamente dito, pois o sentido da orientação não importa - isto é, o sistema é o mesmo por rotações do diretor múltiplas de π , e não de 2π . As flutuações elásticas fazem com que o diretor oscile em torno desta direção \hat{x} por um ângulo $\theta(\vec{x}) \approx -\partial_y u(\vec{x})$. Assim, o parâmetro de ordem orientacional pode ser definido como $e^{2i\theta(\vec{x})}$. Seu valor médio pode ser calculado usando-se novamente a expansão em cumulantes:

$$\left\langle e^{2i\theta(\vec{x})} \right\rangle = e^{-2\left\langle \theta^2(\vec{x}) \right\rangle} .$$
 (1.71)

Como no espaço de Fourier temos $\theta_{\vec{q}} \approx -iq_y u_{\vec{q}}$, o expoente pode ser calculado através da função de correlação (1.61):

$$2 \left\langle \theta^2 \left(\vec{x} \right) \right\rangle = \frac{1}{2\pi^2 B} \int \frac{q_y^2 d^2 q}{q_x^2 + \lambda^2 q_y^4} 2 \left\langle \theta^2 \left(\vec{x} \right) \right\rangle = \frac{2}{\pi^2 B \lambda} \int_0^\Lambda \frac{dq_y q_y^2}{q_y^2} \arctan\left(\frac{\Lambda}{\lambda q_y^2} \right).$$
(1.72)

A aproximação $\Lambda \gg \lambda$, correspondente a $q_0 \gg a$, permite substituir a função arco-tangente por $\pi/2$, de modo que o valor médio do parâmetro de ordem fica:

1.4. Flutuações elásticas e o derretimento da fase modulada

$$\left\langle e^{2i\theta(\vec{x})} \right\rangle = e^{-\frac{\Lambda}{\pi B\lambda}} = \text{cte}.$$
 (1.73)

Portanto, a ordem orientacional da fase de listras bidimensional não é destruída pelos fônons. Contudo, existem ainda outros tipos de excitações no sistema que não são contempladas pelo tipo de deformação elástica $u(\vec{x})$ considerada anteriormente: os defeitos topológicos (ver [9], por exemplo, ou [42] para uma revisão). Eles recebem este nome pois não se pode fazê-los desaparecer apenas com uma deformação contínua do parâmetro de ordem. As flutuações elásticas representadas na figura 1.14 não são defeitos topológicos, pois podemos recuperar a configuração de listras perfeitamente alinhadas se distorcermos continuamente a curva pontilhada até ela se tornar uma reta.

Um defeito topológico possui um núcleo em que a simetria subjacente do sistema é quebrada - ou seja, um núcleo com uma singularidade - cercado por uma região na qual o parâmetro de ordem varia mais suavemente. Um vórtice em uma rede de spins planares é, provavelmente, o exemplo mais evidente de um defeito topológico. Este tipo de excitação possui uma estabilidade topológica que, em geral, implica em uma estabilidade física. Defeitos topológicos distintos são classificados de acordo com as suas cargas topológicas, as quais estão associadas aos grupos de homotopia do espaço do parâmetro de ordem \mathcal{M} . O grupo de homotopia denotado por π_n (\mathcal{M}) é o grupo dos mapas que levam de um circuito fechado $\mathbf{S_n}$ no espaço real de n+1 dimensões a um circuito fechado no espaço de configurações \mathcal{M} . Todos os mapas que podem ser continuamente deformados em um único mapa pertencem à mesma classe de homotopia e correspondem a uma mesma carga topológica.

Na fase de listras bidimensional, são encontrados basicamente dois tipos de excitações topológicas: as discordâncias (do inglês dislocations) e as disclinações (do inglês disclinations), representadas na figura 1.16. Uma discordância corresponde, grosso modo, a incluir (ou retirar) uma ou mais listras "semi-infinitas" em um certo ponto, como esquematizado na figura $1.16(a)^5$. A carga topológica deste defeito é obtida do seguinte modo: considere, no sistema de listras perfeitamente alinhadas, um circuito fechado Γ em torno do ponto no qual será introduzido o defeito. Na presença da discordância, o circuito não mais se fechará e a distância entre seu ponto inicial e final será um múltiplo m da largura $d \propto q_0^{-1}$ de uma faixa: se for negativo, corresponde à inclusão de m listras à direita, mas se for positivo, corresponde à retirada de m listras naquele ponto. Assim, a carga m da discordância está associada a um campo de deformação singular u_D através da relação:

$$\oint_{\Gamma} \vec{\nabla} u_D \cdot d\vec{l} = md.$$
(1.74)

Esta relação pode ser entendida matematicamente usando o conceito de grupos de homotopia. O espaço do parâmetro de ordem \mathcal{M} , neste caso, é representado por uma reta na qual pontos separados por uma distância múltipla de *d* são identificados como o mesmo, devido à periodicidade da fase de listras. Topologicamente, este espaço é equivalente à superfície esférica unidimensional - ou seja, um círculo - de maneira que $\mathcal{M} = \mathbf{S}_1$. Os circuitos fechados Γ no espaço real também são topologicamente equivalentes a \mathbf{S}_1 . Segue da Topologia o resultado que

 $^{^5}$ Esta é, na verdade, um tipo especial de discordância denominada discordância de extremidade - do inglês edge dislocation



Figura 1.16. Exemplos de defeitos topológicos encontrados na fase de listras em duas dimensões. (a) discordância de carga m = -1, correspondente à inclusão de uma faixa semi-infinita à direita. (b) Disclinação de carga $\kappa = -1/2$ e (c) disclinação de carga $\kappa = 1/2$. Observe que o par ligado das disclinações (b) e (c) equivale a uma discordância. Adaptada de [11].

 $\pi_1(\mathbf{S_1}) = \mathbb{Z}$, isto é, o grupo de homotopia é isomórfico ao grupo dos números inteiros, de modo que podemos associar a cada defeito topológico um número inteiro m, o qual nada mais é que a sua carga topológica.

As disclinações, também representadas na figuras 1.16(b) e (c), são defeitos que custam uma energia bem maior que a necessária para se produzir uma discordância. Elas estão associadas a rotações e, portanto, à orientação das listras. Como o sistema é invariante por uma mudança no sentido do diretor - isto é, rotações do diretor que sejam múltiplas de π - existem disclinações com cargas topológicas fracionárias. A carga é definida de maneira análoga ao caso das discordâncias e é uma medida da variação do diretor em torno de um circuito fechado Γ :

$$\oint_{\Gamma} \vec{\nabla} \theta \cdot d\vec{l} = 2\pi\kappa \,. \tag{1.75}$$

Neste caso, o espaço do parâmetro de ordem \mathcal{M} é um círculo no qual dois pontos diametralmente opostos são identificados como o mesmo ponto. Este espaço é denotado por \mathbf{P}_1 e recebe o nome de plano projetivo. Novamente, o circuito fechado Γ é topologicamente equivalente a \mathbf{S}_1 . Mostra-se que π_1 (\mathbf{P}_1) = \mathbb{Z} , permitindo que classifiquemos as disclinações de acordo com suas cargas topológicas.

Na figura 1.16(b), representamos uma disclinação de carga $\kappa = -\frac{1}{2}$, enquanto na figura 1.16(c), temos a correspondente à carga $\kappa = \frac{1}{2}$. Se "colássemos" o lado direito da figura 1.16(b) com o lado esquerdo da 1.16(c), fica claro que obteríamos uma discordância. Esta observação ilustra o conceito de que uma discordância corresponde a um par ligado de disclinações, indicando que a energia necessária para se excitar uma disclinação isolada deve ser muito maior que a necessária para se excitar uma discordância Fazendo uma analogia com o caso da rede de spins planares, isto é equivalente ao fato de a energia necessária para se criar um vórtice isolado ser maior que a necessária para se excitar uma para de vórtice e anti-vórtice (ver Apêndice A).

Assim, podemos considerar inicialmente a presença apenas de discordâncias na fase de listras bidimensional. A energia necessária para se criar uma discordância isolada centrada na origem e com carga m é dada por [4]:

1.4. Flutuações elásticas e o derretimento da fase modulada

$$\frac{E_D}{L} = \frac{m^2 d^2 \lambda B}{2\alpha} + E_c \,, \tag{1.76}$$

em que L é o comprimento da discordância, α é um *cutoff* associado ao comprimento do núcleo do defeito (usualmente da ordem da largura das listras d) e E_c é a energia deste núcleo. Esta energia independe do tamanho do sistema e, portanto, permanece finita no limite termodinâmico. Logo, discordâncias livres aparecem espontaneamente a qualquer temperatura na fase de listras, com uma densidade n_D dada por:

$$n_D = \frac{1}{d^2} \exp\left(-E_D/k_B T\right) \,. \tag{1.77}$$

Para se avaliar os efeitos destas discordâncias livres na ordem de longo alcance orientacional da fase de listras, inicialmente é necessário se obter a expressão do campo de deformação singular u_D que descreve uma discordância livre de carga m e centrada na origem. Para isso, basta resolver o problema variacional de minimização da energia livre (1.58) sujeita ao vínculo (1.74). No espaço de Fourier, o resultado é dado por [11]:

$$u_{\vec{q}}^{(D)} = -\frac{md}{2\pi} \frac{q_x}{q_y \left(q_x^2 + \lambda^2 q_y^4\right)} \,. \tag{1.78}$$

No caso de várias discordâncias centradas em diferentes pontos e com diferentes cargas, pode-se usar uma distribuição de carga $m(\vec{x})$ em conjunto com a expressão anterior. O cálculo da energia associada a esta distribuição de discordâncias resulta em:

$$\mathcal{H}_{D}[m] = \frac{1}{2} \int d^{2}x d^{2}x' m\left(\vec{x}\right) U\left(\vec{x} - \vec{x}'\right) m\left(\vec{x}'\right) + \frac{E_{D}}{k_{B}T} \int d^{2}x m^{2}\left(\vec{x}\right) , \qquad (1.79)$$

em que:

$$U(\vec{x}) = \frac{1}{4} B d^2 \left(\frac{\lambda}{\pi |x|}\right)^{1/2} e^{-\frac{y^2}{4\lambda |x|}}.$$
 (1.80)

Na expressão (1.79), o primeiro termo representa a interação entre as discordâncias, enquanto o segundo termo refere-se à soma das energias individuais. Vale salientar que a integração deve ser feita evitando-se a região $|\vec{x} - \vec{x}'| < d$, já que d é o comprimento típico do núcleo de uma discordância.

A partir destes resultados, podemos agora recalcular a função de correlação orientacional incluindo os efeitos das discordâncias livres presentes no sistema. No espaço de Fourier, temos:

$$\left\langle \theta_{\vec{q}}\theta_{-\vec{q}} \right\rangle = \frac{\left(2\pi\right)^2 q_y^2}{B\left(q_x^2 + \lambda^2 q_y^4\right)} + \left\langle \theta_{\vec{q}}^{(D)} \theta_{-\vec{q}}^{(D)} \right\rangle \,,\tag{1.81}$$

em que o primeiro termo refere-se à contribuição das flutuações elásticas não-singulares e o segundo termo refere-se às discordâncias (1.78). Generalizando esta expressão para uma distribuição de discordâncias e usando que $\theta_D = -\partial_y u_D$, obtemos:

$$\langle \theta_{\vec{q}} \theta_{-\vec{q}} \rangle = \frac{(2\pi)^2 q_y^2}{B \left(q_x^2 + \lambda^2 q_y^4 \right)} + \frac{d^2 q_x^2}{\left(q_x^2 + \lambda^2 q_y^4 \right)^2} \left\langle m_{\vec{q}} m_{-\vec{q}} \right\rangle \,. \tag{1.82}$$

A função de correlação que aparece no segundo termo é difícil de calcular, pois $m_{\vec{q}}$ é uma função que só assume valores inteiros. Entretanto, para temperaturas não muito baixas, pode-se fazer uma aproximação do tipo Debye-Hückel e tratá-las como funções contínuas. Assim, como o funcional (1.79) é quadrático nos campos m, pode-se obter diretamente de sua transformada de Fourier a função de correlação $\langle m_{\vec{q}}m_{-\vec{q}} \rangle$:

$$\mathcal{H}_{D}[m] = \frac{1}{2(2\pi)^{2}} \int d^{2}q m_{\vec{q}} \left[\frac{d^{2}B\lambda^{2}q_{y}^{2}}{q_{x}^{2} + \lambda^{2}q_{y}^{4}} + \frac{2E_{D}d^{2}}{k_{B}T} \right] m_{-\vec{q}}.$$
 (1.83)

Substituindo-a em (1.82), obtém-se, em potências dominantes de q_x e q_y :

$$\left\langle \theta_{\vec{q}} \theta_{-\vec{q}} \right\rangle = \frac{\left(2\pi\right)^2}{B\lambda^2 q_y^2 + \left(\frac{2E_D}{k_B T}\right) q_x^2} \,. \tag{1.84}$$

A função de correlação (1.84) é equivalente à obtida para a fase nemática de um cristal líquido caracterizada por um diretor \vec{N} [4]. A esta fase corresponde a Hamiltoniana (conhecida também como energia livre de Frank):

$$\mathcal{H}_{Frank}\left[\vec{N}\right] = \frac{1}{2} \int d^2x \left\{ K_1 \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{N}\right)^2 + K_3 \left[\vec{N} \times \left(\vec{\nabla} \times \vec{N}\right)\right]^2 \right\} \,, \tag{1.85}$$

em que as constantes de splay K_1 e de bend K_3 são dadas por:

$$K_1 = B\lambda^2$$

$$K_3 = \frac{2E_D}{k_B T}.$$
(1.86)

Portanto, devido à atuação dos fônons e à presença de discordâncias livres, a fase de listras (análoga à fase esmética-A em cristais líquidos) se transforma em uma fase do tipo nemática para qualquer temperatura não-nula. As discordâncias livres introduzem uma escala de comprimento característica ξ_D associada à sua densidade n_D (1.77), isto é, $\xi_D = n_D^{-1/2}$. Desse modo, o caráter nemático só é observado para comprimentos maiores do que ξ_D ; caso contrário, as flutuações elásticas não-singulares dominam. Logo, pode-se conceber esta fase nemática como sendo composta por células de tamanho típico ξ_D cuja ordem interna é descorrelacionada apenas por excitações do tipo fônons, como esquematizado na figura 1.17. A orientação de cada célula, então, nada mais é que a média das orientações das listras englobadas por ela.

Pode-se ainda incluir os termos não-lineares da Hamiltoniana de Frank (1.85) e estudá-la no contexto do Grupo de Renormalização [11]. As constantes de Frank são renormalizadas em um mesma função $K(T) \sim \exp\left(\frac{E_D}{k_B T}\right)$ para comprimentos de onda grandes o suficiente e temperaturas não muito baixas. Assim, a Hamiltoniana de Frank assume a forma:

$$\mathcal{H}_{nem}\left[\theta\right] = \frac{1}{2}K \int d^2x \left|\vec{\nabla}\theta\right|^2 \,, \tag{1.87}$$

em que o ângulo θ refere-se às flutuações do diretor em torno da direção de alinhamento da fase nemática. Logo, temos um problema equivalente ao modelo XY em duas dimensões. Os vórtices que aparecem naquele caso são traduzidos aqui nas disclinações (1.75), conforme explicado no



Figura 1.17. Representação da fase nemática resultante da atuação de flutuações elásticas e discordâncias livres na fase de listras bidimensional, caracterizada pela presença de células de tamanho típico ξ_D descorrelacionadas apenas por modos fonônicos. Esta configuração é análoga aos grupos cibotáticos encontrados em fases nemáticas de cristais líquidos. Adaptada de [11].

Apêndice A. A qualquer temperatura finita existem pares ligados dessas disclinações, que nada mais são que as discordâncias livres que discutimos anteriormente. A presença delas renormaliza a constante $K \to \tilde{K}(T)$ de acordo com o que discutimos nos parágrafos anteriores. A uma certa temperatura, passa a ser energeticamente favorável que esses pares se desliguem, formando disclinações livres e induzindo uma transição do tipo Kosterlitz-Thouless para uma fase chamada de líquido isotrópico - isto é, sem ordem de longo alcance translacional ou orientacional (mais detalhes sobre a transição de Kosterlitz-Thouless estão apresentados no Apêndice A).

Por completeza, apresentamos a função de correlação do parâmetro de ordem nemático $e^{2i\theta(\vec{x})}$, que mede o grau de ordem orientacional do sistema. Ela pode ser efetuada diretamente a partir da Hamiltoniana (1.87) e de uma expansão em cumulantes:

$$\left\langle e^{2i\theta(\vec{x})}e^{-2i\theta(0)}\right\rangle = e^{-\frac{1}{2}\left\langle 4[\theta(\vec{x})-\theta(0)]^2\right\rangle},\qquad(1.88)$$

em que:

$$\frac{1}{2}\left\langle \left[\theta\left(\vec{x}\right) - \theta\left(0\right)\right]^{2} \right\rangle = \frac{1}{\left(2\pi\right)^{2}} \int d^{2}q \frac{\left(1 - e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}}\right)}{\tilde{K}(T)q^{2}}.$$
(1.89)

Usando os resultados acerca da transição de Kosterlitz-Thouless (Apêndice A), nota-se que a ordem orientacional das listras persiste como ordem de quase-longo alcance (estamos denotando $|\vec{x}| = r$):

$$\left\langle e^{2i\theta(\vec{x})}e^{-2i\theta(0)}\right\rangle \sim r^{-\frac{2}{\pi \vec{K}(T)}} = r^{-\eta(T)},$$
 (1.90)

até que os pares de disclinações de desliguem à temperatura T_o na qual:



Figura 1.18. Diagrama de fases do sistema de listras em duas dimensões: somente a T = 0 há ordem posicional e orientacional, e o sistema se encontra na fase esmética. Para $T < T_o$ há apenas ordem orientacional de quase-longo alcance e o sistema está na fase nemática. Em $T = T_o$, o desligamento dos pares ligados de disclinações induzem uma transição do tipo Kosterlitz-Thouless para a fase de líquido isotrópico, em que não há nem ordem posicional nem ordem orientacional.

$$\eta(T_o) = \frac{1}{4} \quad \Rightarrow \quad \tilde{K}(T_o) = \frac{8}{\pi}.$$
(1.91)

Portanto, reunindo todos os resultados obtidos, podemos traçar o seguinte diagrama de fases, esquematizado na figura 1.18: em duas dimensões, a fase de listras propriamente dita, com ordem de longo alcance posicional e orientacional (correspondente a uma fase líquido-cristalina esmética-A) só existe a T = 0. A qualquer temperatura finita, flutuações elásticas do tipo fônons destroem a ordem posicional, mas não a orientacional, e surgem discordâncias livres no sistema: tem-se um estado correspondente a uma fase líquido-cristalina nemática. Essas discordâncias, que podem ser encaradas como pares ligados de disclinações, fazem com que a ordem orientacional persista sob a forma de um ordenamento de quase-longo alcance até uma temperatura T_o na qual os pares se desligam e o sistema perde qualquer ordem de longo-alcance: tem-se, então, um estado correspondente a uma fase líquida isotrópica e uma transição do tipo Kosterlitz-Thouless. É importante salientar que, em um artigo recente [39], aplicando apenas o Grupo de Renormalização e o método de campo médio auto-consistente à Hamiltoniana de Brazovskii (1.1), Barci e Stariolo predizem a ocorrência de uma fase nemática anterior à fase de listras, sob determinadas condições satisfeitas pelo parâmetro quártico u.

Este cenário é bastante alterado na presença de um campo cristalino que defina orientações preferenciais para as listras, pois surge, neste caso, um termo adicional do tipo $\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2$ na Hamiltoniana elástica (1.58). Isso faz com que a energia necessária para se excitar uma discordância livre deixe de ser finita, fazendo com que estes defeitos topológicos apareçam a baixas temperaturas apenas como pares ligados. Conforme mostram os autores de [43], em tal situação a ordem posicional das listras (ou seja, a fase esmética) persiste para temperaturas finitas como ordem de quase-longo alcance, até que os pares de discordâncias se desliguem e induzam uma transição do tipo Kosterlitz-Thouless. A fase nemática subseqüente não mais é destruída pelo desligamento dos pares de disclinações. Antes de esse processo ocorrer, novos defeitos topológicos que surgem devido à existência de direções preferenciais determinadas pelo campo cristalino - chamados de defeitos de rotação das paredes de domínio das listras e representados na figura 1.19 - induzem uma transição que não é do tipo Kosterlitz-Thouless para uma fase líquida que conserva a simetria subjacente introduzida pelo campo cristalino.

Para finalizar, é importante mencionar que o efeito das flutuações elásticas sobre outras fases

1.4. Flutuações elásticas e o derretimento da fase modulada



Figura 1.19. Dois tipos de defeitos topológicos de rotação das paredes de domínio das listras, para o caso em que o sistema está submetido a um campo cristalino que define duas direções preferenciais para o alinhamento das listras (simetria tetragonal). Adaptada de [43].

moduladas é diferente do caso da fase de listras. Como demonstrado em [6], a Hamiltoniana elástica da fase de bolhas em duas dimensões assume a forma:

$$\mathcal{H}_{el}[u] = \frac{1}{2} \int d^2 x \left(2\mu u_{ij}^2 + \lambda u_{ii}^2 \right) \,, \tag{1.92}$$

com $\mu=\lambda$ denotando os coeficientes de Lamé apropriados e:

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left(\partial_i u_j + \partial_j u_i \right) \,, \tag{1.93}$$

já que o campo de deformação elástica agora tem componentes em ambas as direções, $u_x(x, y)$ e $u_y(x, y)$. Mostra-se que, nesta situação, a fase de bolhas possui ordem translacional de quase-longo alcance até uma temperatura na qual os pares de discordâncias se desligam, implicando em uma transição do tipo Kosterlitz-Thouless para uma fase nemática com ordem orientacional apenas.

Capítulo 2

Ferromagnetos Dipolares com Dimensões Finitas

Neste capítulo, desenvolvemos uma generalização da solução auto-consistente do modelo de Brazovskii apresentada anteriormente para o caso de um sistema com dimensões finitas e condições de contorno não-periódicas. Nossa motivação principal reside em investigar a intrincada estrutura de domínios magnéticos observada nos terraços ferromagnéticos de filmes finos de MnAs (arseneto de Manganês) crescidos sobre GaAs (arseneto de Gálio), um promissor candidato a aplicações no campo da spintrônica. Especificamente, comparamos as previsões deste modelo com resultados experimentais de microscopia de força magnética e de espalhamento ressonante de raios X, observando uma boa concordância qualitativa. Além disso, a fim de investigarmos a conexão entre a reorientação magnética e a mudança na forma das curvas de histerese observada neste material, estendemos a modelagem a parâmetros de ordem vetoriais, criando uma base sólida para o desenvolvimento de uma expressão fenomenológica da energia livre que seja apropriada à descrição do sistema.

2.1. Estrutura magnética dos filmes finos de MnAs:GaAs

O recente interesse em crescer filmes finos de MnAs sobre GaAs, denotados MnAs:GaAs, não está relacionado apenas a objetivos puramente acadêmicos, mas também às promissoras aplicações tecnológicas que deles podem resultar (para um recente artigo de revisão sobre o tema, ver [44]). À temperatura ambiente, o MnAs em *bulk* é um ferromagneto e o GaAs é um semicondutor. Assim, uma combinação destes dois materiais em uma heteroestrutura híbrida mesclaria ambas essas características, abrindo a possibilidade de se construir um dispositivo capaz de combinar os graus de liberdade de spin com propriedades de transporte eletrônico - ou seja, um dispositivo spintrônico [45]. De fato, vários estudos sobre estas heteroestruturas têm investigado suas possíveis aplicações como injetores de spin ou válvulas de spin (ver referências em [44]). Desse modo, é fundamental um profundo entendimento sobre as propriedades físicas desses filmes finos, especialmente no que concerne a sua estrutura magnética.

O MnAs em *bulk* apresenta uma transição abrupta entre uma fase ferromagnética e uma fase paramagnética a uma temperatura de aproximadamente 45 °C, acompanhada de uma transição estrutural. Abaixo desta temperatura, a estrutura cristalina do MnAs é do tipo hexagonal, sendo que os átomos de Mn encontram-se nos vértices e no centro do hexágono, enquanto os átomos de As estão em posições que intercalam os planos hexagonais, conforme mostra a figura 2.1. Nesta situação, diz-se que o MnAs encontra-se na sua fase α , que possui propriedades ferromagnéticas. Entretanto, acima da temperatura de transição, há uma variação no tamanho



Figura 2.1. Estrutura cristalina hexagonal da fase α do MnAs (figura à esquerda). A célula unitária é apresentada em verde na projeção planar com os respectivos eixos cristalográficos (figura à direita).



Figura 2.2. Esquema geral da alternância das fases α (ferromagnética e hexagonal) e β (paramagnética e ortorrômbica) em filmes finos de MnAs:GaAs.

da célula unitária devido a uma deformação de cerca de 1% do eixo a do hexágono. Assim, o material passa a ter uma estrutura ortorrômbica e adquire propriedades paramagnéticas: é a chamada fase β [46].

O cenário é bem diferente nos filmes finos de MnAs crescidos por epitaxia sobre substratos de GaAs (para os detalhes sobre o processo de crescimento, ver [44], por exemplo), nos quais surge uma larga região de coexistência entre as fases $\alpha \in \beta$, de aproximadamente 0 °C a 50 °C. Neste intervalo de temperaturas, as fases se alternam em um padrão de terraços de altura h da ordem de alguns poucos nanômetros (fase α) seguidos de vales planos (fase β), conforme esquematizado na figura 2.2. Tal padrão se repete com um período característico de comprimento s que permanece constante durante toda a região de coexistência e que só depende da espessura do filme D através da relação aproximada s = 4, 8D. Esta configuração peculiar é um fenômeno estrutural que ocorre devido às diferenças entre os parâmetros de rede do filme e do substrato, além da própria diferença entre os coeficientes de dilatação térmica das fases $\alpha \in \beta$ [47, 48, 49, 50, 51].

Apesar de o período s se manter constante durante toda a região de coexistência, a largura d dos terraços (e, conseqüentemente, a largura dos vales) varia: enquanto para temperaturas



Figura 2.3. Comportamento do comprimento do terraço ferromagnético (fase α) em função da temperatura do sistema.

mais baixas os terraços ferromagnéticos são largos, para temperaturas mais altas eles se tornam bastante estreitos, conforme esquematizado na figura 2.3. Medidas de espalhamento de raios X moles pelos filmes finos determinaram a dependência da largura d do terraço ferromagnético com a temperatura, sugerindo uma relação aproximadamente linear [50]:

$$d(T) = A - BT, \qquad (2.1)$$

Para o caso de um filme de espessura D = 130 nm, tem-se os valores A = 600 nm e $B = 12 \text{ nm}/ \,^{\circ}\text{C}$ [50]. Além das propriedades estruturais dos filmes finos, experimentos envolvendo microscopia de força magnética (MFM) [49, 52] e espalhamento ressonante de raios X [13] elucidaram as características dos domínios magnéticos dentro dos terraços formados pela fase α .

Na figura 2.4, são apresentados os padrões topográficos (obtidos via microscopia de força atômica, AFM) e magnéticos (obtidos via MFM) de filmes finos de MnAs:GaAs em duas temperaturas distintas [13]. A partir dos padrões de AFM, é possível identificar claramente a estrutura de terraços alternados discutida anteriormente. Além disso, nota-se uma mudança na estrutura de domínios magnéticos das faixas α quando a temperatura aumenta. A proposta apresentada, em acordo com as medidas complementares de raios X, é que ocorre uma reorientação magnética [13]: para baixas temperaturas, em que os terraços são largos, a magnetização é praticamente uniforme e aponta na direção \hat{x} (de acordo com o sistema de coordenadas mostrado na figura 2.2). Quando a temperatura aumenta, os terraços encolhem e a magnetização passa a apontar na direção \hat{z} , formando estruturas moduladas correspondentes a três ou dois domínios. Ambas as estruturas - com magnetização uniforme apontando na direção \hat{x} ou modulada na direção \hat{z} - estão esquematizadas na figura 2.5, e serão denominadas, daqui por diante, de estruturas tipo I e tipo II, respectivamente. Vale mencionar que a magnetização nunca aponta na direção \hat{y} devido à presença de um forte campo cristalino anisotrópico.



Figura 2.4. Padrões topográficos, obtidos via AFM, ((a) e (c)) e padrões magnéticos, obtidos via MFM ((b) e (d)), dos filmes finos de MnAs:GaAs para $T = 21 \,^{\circ}\text{C}$ (esquerda) e $T = 31 \,^{\circ}\text{C}$ (direita). As fases α (ferromagnética) e β (paramagnética) estão indicadas na figura.



Figura 2.5. Configurações magnéticas propostas para descrever as imagens de MFM referentes aos filmes finos de MnAs:GaAs. Para temperaturas baixas na região de coexistência, prevalece a estrutura tipo I, em que a magnetização aponta na direção \hat{x} , sendo modulada ao longo de \hat{y} e uniforme ao longo de \hat{x} (figura à esquerda). Para temperaturas mais altas, a magnetização aponta na direção \hat{z} e apresenta modulação nas direções $\hat{x} \in \hat{y}$ - trata-se da estrutura tipo II (figura à direita). Modulações ao longo da direção \hat{x} correspondendo a três e dois domínios foram observadas em [13], enquanto em [52] foram encontradas configurações de quatro e cinco domínios.

O principal mecanismo causador da reorientação magnética seria, neste contexto, um campo anisotrópico desmagnetizante [53] originado da interação dipolar entre os spins dentro dos terraços. Cálculos simples da energia de anisotropia de forma corroboram tal interpretação [13]. Entretanto, uma abordagem mais elaborada se faz necessária para compreender as modulações observadas nas estruturas tipo II e a uniformidade da magnetização ao longo do eixo x nas estruturas tipo I. Experimentos posteriores envolvendo MFM indicaram a presença de modulações ainda maiores nas estruturas tipo II, correspondendo a quatro ou cinco domínios alternados [52]. O primeiro passo rumo a esta modelagem mais completa consiste em incluir as interações de troca e dipolar em um sistema com a geometria do terraço - ou seja, um bloco de largura finita d, espessura finita D e comprimento praticamente infinito. Como veremos na próxima seção, este problema corresponde ao modelo de Brazovskii em um sistema de dimensões finitas com condições de contorno apropriadas [14].

Além das imagens de MFM, outras medidas também apontam para uma reorientação magnética dentro dos terraços α quando a temperatura do sistema aumenta. Medidas de espalhamento ressonante de raios X moles permitiram a obtenção das curvas de histerese dos filmes finos de MnAs:GaAs sob a aplicação de um campo magnético na direção \hat{x} [13]. Os resultados, apresentados na figura 2.6, indicam uma alteração na forma das curvas, passando de uma forma quadrada a baixas temperaturas para uma forma em S para altas temperaturas. O fato interessante é que esta mudança é acompanhada pela observação das estruturas tipo II com



Figura 2.6. Curvas de histerese dos filmes finos de MnAs:GaAs obtidas através de espalhamento ressonante de raios X moles para diferentes temperaturas. O campo externo é aplicado na direção \hat{x} .

modulação correspondente a três domínios. Ao final deste capítulo, baseados nos resultados do modelo de Brazovskii em dimensões finitas, apresentaremos uma expressão fenomenológica para a energia livre que, combinada com o método de Stoner-Wohlfarth [12], é capaz de descrever qualitativamente esta mudança na forma das curvas de histerese, relacionando-a com o fenômeno de reorientação magnética [15].

2.2. Hamiltoniana efetiva de Ginzburg-Landau: o papel da interação dipolar

Baseados na estrutura dos terraços ferromagnéticos dos filmes finos de MnAs:GaAs descritos na seção anterior, vamos considerar um modelo em que spins estão submetidos às interações de troca e dipolar, além de permanecerem confinados em uma geometria correspondente a um bloco tridimensional de largura d, espessura D e comprimento infinito. Por envolver tanto a interação de troca quanto a dipolar, este sistema é conhecido como ferromagneto dipolar. A dependência da largura do terraço com a temperatura será incluída posteriormente, de acordo com a expressão empírica (2.1). O sistema de coordenadas está apresentado na figura 2.7, com a seguinte correspondência em relação aos eixos cristalográficos dos filmes finos: $\hat{x} = [11\overline{2}0]$, $\hat{y} = [0001]$ e $\hat{z} = [\overline{1}100]$.

Para fins de simplificação, consideramos os spins com simetria Ising, apontando apenas na direção \hat{z} . Além disso, por se tratar de um filme fino cuja direção de crescimento é a \hat{z} , assumimos que os spins dependem apenas das coordenadas $x \in y$. Como nos filmes finos de MnAs:GaAs as listras ferromagnéticas encontram-se intercaladas por listras paramagnéticas,



Figura 2.7. Esquema geral do modelo de um ferromagneto de Ising dipolar confinado à geometria de um bloco de largura d e espessura D finitas, mas comprimento infinito, com condições de contorno do tipo Dirichlet. FM denota a fase ferromagnética, enquanto PM denota a fase paramagnética. A origem do sistema de coordenadas é representada por um ponto no meio da borda esquerda do bloco.

impomos a condição de contorno adicional de que o parâmetro de ordem do sistema ϕ se anule nas bordas do bloco, como esquematizado na figura 2.7 (estas condições de contorno são conhecidas como condições do tipo Dirichlet). Apesar de a magnetização do MnAs:GaAs ter um caráter vetorial, este modelo com um parâmetro de ordem escalar deve ser capaz de descrever as principais propriedades do sistema que resultam dos ingredientes físicos mais básicos, a saber, a presença de interações competitivas e as condições de contorno apropriadas. Em particular, esperamos uma boa descrição no intervalo de temperaturas em que se observam as estruturas do tipo II discutidas anteriormente. Nas próximas seções, focaremos na obtenção e na resolução da Hamiltoniana de Ginzburg-Landau que descreve este sistema, adiando a discussão sobre sua aplicação ao caso concreto dos filmes finos para mais tarde, na seção 2.4.

O caso de um ferromagneto dipolar de Ising na forma de um bloco com largura $d \to \infty$ foi estudado no trabalho seminal de Garel e Doniach [6] (daqui por diante, iremos nos referir a esta geometria como a de um bloco infinito). Naquele artigo, foi mostrado que a Hamiltoniana que descreve o sistema assume a forma de Brazovskii (1.26). A presente situação difere da anterior não só pelo simples fato de um dos comprimentos do bloco tornar-se finito, mas também pelos vínculos impostos pelas condições de contorno de Dirichlet.

A fim de obter a Hamiltoniana que descreve o sistema proposto, consideremos, primeiramente, a interação de troca. Microscopicamente, ela é descrita pela Hamiltoniana de Ising¹:

$$H_{\text{Ising}} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j , \qquad (2.2)$$

em que J é o parâmetro de troca, S_i é o spin no sítio i da rede e $\langle i, j \rangle$ denota pares de primeiros vizinhos. Para simplificar, assumimos uma rede cúbica com parâmetro de rede a. Esta escolha não introduz erros grosseiros na Hamiltoniana efetiva de Ginzburg-Landau se comparada à escolha mais realista de uma rede hexagonal, já que as propriedades do sistema para longos comprimentos de onda não devem depender da estrutura microscópica subjacente. Através de

¹ Para diferenciar a Hamiltoniana microscópica da Hamiltoniana efetiva de Ginzburg-Landau, reservamos a notação caligráfica \mathcal{H} para esta última e usamos a notação ordinária H para a primeira.



Figura 2.8. Representação, em uma dimensão, do processo de granulação grossa, descrevendo os spins que residem nos sítios de uma rede unidimensional por uma função contínua e suave $\phi(x)$.

uma transformação de Hubbard-Stratonovich, delineada em detalhes no Apêndice B, pode-se escrever a energia livre correspondente ao modelo de Ising como uma Hamiltoniana efetiva de Ginzburg-Landau (daqui por diante, usamos a convenção de tomar $k_B = 1$):

$$\mathcal{H}_{\text{troca}} = \int d^3x \left[\frac{J}{2aT} \left| \vec{\nabla} \varphi\left(\vec{x}\right) \right|^2 + \left(\frac{T - T_c}{2a^3T} \right) \varphi^2\left(\vec{x}\right) + \frac{T_c}{12a^3T} \varphi^4\left(\vec{x}\right) \right] , \qquad (2.3)$$

em que $T_c = zJ$, z é o número de primeiros vizinhos e $\varphi(\vec{x})$ é o parâmetro de ordem escalar do sistema. Apesar de estarmos considerando uma rede cúbica, no que se segue vamos tomar o número de primeiros vizinhos correspondente à rede hexagonal, pois precisaremos estimar o valor de J para os filmes finos de MnAs:GaAs a partir de dados experimentais disponíveis na literatura. De qualquer modo, conforme já apontamos, esta escolha não modifica as principais predições do modelo.

No que se refere ao parâmetro de ordem $\varphi(\vec{x})$, podemos intrepretá-lo como uma granulação grossa (da expressão em inglês *coarse-grained*) dos spins que residem nos sítios da rede subjacente, de modo a transformar uma quantidade discreta (os spins S_i) em uma grandeza que varia suave e continuamente (o parâmetro de ordem $\varphi(\vec{x})$), conforme esquematizado na figura 2.8.

Para lidarmos com as condições de contorno, escrevemos explicitamente o parâmetro de ordem na forma:

$$\varphi\left(\vec{x}\right) = \phi\left(x, y\right)\theta\left(x\right)\theta\left(d - x\right)\theta\left(D/2 - z\right)\theta\left(D/2 + z\right), \qquad (2.4)$$

em que $\phi(x, y)$ denota o parâmetro de ordem na região interna ao bloco e $\theta(x)$ é a função degrau de Heaviside-Lorentz - isto é, vale 1 para x > 0 e 0 para x < 0. Expandindo $\phi(x, y)$ em série de Fourier, obtemos:

$$\phi(x,y) = \sum_{q_x,q_y} \phi_{q_x,q_y} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}}.$$
(2.5)

Como o bloco é ilimitado na direção y, podemos transformar a soma sobre q_y em uma integração fazendo a substituição usual de condições de contorno periódicas:

$$\sum_{q_y} \to \frac{L_y}{2\pi} \int dq_y \,, \tag{2.6}$$

em que L_y representa o comprimento ao longo da direção y. Já no que concerne a variável x, dadas as condições de contorno do tipo Dirichlet, deve-se sempre manter a soma discreta sobre a variável q_x . A imposição das condições de contorno $\phi(0, y) = \phi(d, y) = 0$ resulta na discretização da componente x do momento, de modo que a série de Fourier (2.5) passa a ser escrita como:

$$\phi(x,y) = \sum_{n>0,q_y} \phi_{n,q_y} \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) e^{iq_y y}, \qquad (2.7)$$

em que n é um número inteiro. Usando a ortogonalidade das funções seno e exponencial complexa:

$$\int_{0}^{d} \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) \sin\left(\frac{n'\pi x}{d}\right) dx = \frac{d}{2}\delta_{n,n'}$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\left(q_{y}+q'_{y}\right)y} dy = 2\pi\delta\left(q_{y}+q'_{y}\right), \qquad (2.8)$$

podemos obter a transformada inversa:

$$\phi_{n,q_y} = \frac{2}{dL_y} \int_0^d \int_{-\infty}^\infty \phi(x,y) \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) e^{-iq_y y} dx dy.$$
(2.9)

Para calcular a contribuição da interação de troca para a energia total do bloco ferromagnético dipolar, substituímos a configuração arbitrária dos spins dentro do bloco (2.7) na Hamiltoniana de Ginzburg-Landau (2.3) e integramos sobre todo o espaço. Usando as propriedades de ortogonalidade e fechamento das funções senoidais, chegamos à seguinte expressão para a densidade de energia de troca, a qual denotaremos $f_{\rm troca}$:

$$f_{\text{troca}} = \frac{E_{\text{troca}}}{DdL_y} = \sum_{n,q_y} \phi_{n,q_y} \left[\frac{J}{4aT} \left(\frac{n^2 \pi^2}{d^2} + q_y^2 \right) + \left(\frac{T - T_c}{4a^3T} \right) \right] \phi_{n,-q_y} + \frac{T_c}{96a^3T} \sum_{\{n_i\},\{q_i\}} \phi_{\{n_1,n_2,n_3\},-q_1-q_2-q_3} \phi_{n_1,q_1} \phi_{n_2,q_2} \phi_{n_3,q_3} , \quad (2.10)$$

em que introduzimos a notação conveniente:

$$\phi_{\{n_1,n_2,n_3\},-q_1-q_2-q_3} = (\phi_{n_1+n_2-n_3} + \phi_{n_1-n_2+n_3} + \phi_{-n_1+n_2+n_3} - \phi_{n_1+n_2+n_3} - \phi_{n_1-n_2-n_3} - \phi_{-n_1+n_2-n_3} - \phi_{-n_1-n_2+n_3})_{,-q_1-q_2-q_3} .$$
(2.11)

No termo quártico de (2.10), as somas podem ser estendidas para todos os valores de n_1 ,

 $n_2 e n_3$ desde que se faça, ao final das somas, $m_{n,q_y} = 0$ toda vez que n < 0. Vale salientar que o mesmo tipo de termo quártico (2.11) aparece em outros contextos nos quais são usadas condições de contorno do tipo Dirichlet [54, 55].

Agora, é necessário obter a contribuição da interação dipolar para a energia total do bloco. Para isso, consideremos o problema equivalente da Magnetostática de determinar a energia de um sistema que possui uma magnetização $\vec{M}(\vec{x})$ na ausência de correntes externas. As equações de Maxwell na matéria são dadas por [56]:

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = 0 \quad e \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0,$$
(2.12)

em que $\vec{H} = \vec{B} - 4\pi \vec{M}$. Da primeira equação, resulta que podemos escrever o campo \vec{H} como o gradiente de um potencial escalar $\vec{H} = -\vec{\nabla}\Phi$. Assim, combinando com a segunda equação, obtemos a equação de Poisson:

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi\rho, \qquad (2.13)$$

em que $\rho=-\vec{\nabla}\cdot\vec{M}$ é a densidade efetiva de "cargas magnéticas". A energia da configuração é, portanto:

$$E_{\text{dipolar}} = \frac{1}{2} \int d^3 x \Phi\left(\vec{x}\right) \rho\left(\vec{x}\right) \,. \tag{2.14}$$

A equação de Poisson é resolvida imediatamente com o auxílio da transformada de Fourier definida anteriormente em (1.5):

$$\Phi_{\vec{q}} = \frac{4\pi\rho_{\vec{q}}}{q^2} \,. \tag{2.15}$$

Assim, passando a expressão da energia (2.14) para o espaço de Fourier, obtemos a forma final que só depende da magnetização em todo o espaço:

$$E_{\rm dipolar} = \frac{1}{4\pi^2} \int d^3 q \frac{|\rho_{\vec{q}}|^2}{q^2} \,. \tag{2.16}$$

No caso de nosso interesse, isto é, o bloco com condições de contorno do tipo Dirichlet, a magnetização se relaciona com a distribuição espacial de spins (2.4) através de:

$$\vec{M}(\vec{x}) = \left(\frac{g\mu_B}{a^3}\right)\varphi(\vec{x})\,\hat{z} = \left(\frac{g\mu_B}{a^3}\right)\phi(x,y)\,\theta(x)\,\theta(d-x)\,\theta(D/2-z)\,\theta(D/2+z)\,\hat{z}\,,\qquad(2.17)$$

em que $g\mu_B$ é o momento magnético do spin, sendo g o fator giromagnético e μ_B , o magneton de Bohr. O módulo da densidade de carga magnética efetiva correspondente a esta magnetização pode ser obtida através de um cálculo direto, usando a série de Fourier (2.7) e o fato de a derivada da função degrau ser a função delta de Dirac:

$$|\rho_{\vec{q}}|^2 = \left(\frac{g\mu_B}{a^3}\right)^2 \frac{8\pi^2 L_y^2}{d^2} \sum_{n,n'} nn' \phi_{n,q_y} \phi_{n',-q_y} \sin^2\left(\frac{q_z D}{2}\right) \frac{\left[1 + (-1)^{nn'+1} \cos\left(q_x d\right)\right]}{\left(q_x^2 - \frac{n^2 \pi^2}{d^2}\right) \left(q_x^2 - \frac{n'^2 \pi^2}{d^2}\right)}.$$
 (2.18)

Na expressão acima, a soma deve ser feita apenas sobre $n \in n'$ de mesmas paridades. O cálculo da energia dipolar é simplificado pelo uso do resultado analítico:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq_z \frac{\sin^2\left(\frac{q_z D}{2}\right)}{\left(q_x^2 + q_y^2 + q_z^2\right)} = \frac{\pi}{2} \frac{\left(1 - e^{-D\sqrt{q_x^2 + q_y^2}}\right)}{\sqrt{q_x^2 + q_y^2}}.$$
(2.19)

Após manipulações envolvendo mudanças de variáveis e passagens entre os limites do contínuo e do discreto de acordo com a prescrição (2.6), obtemos finalmente a densidade de energia dipolar do bloco, em unidades da energia térmica k_BT :

$$f_{\text{dipolar}} = \frac{E_{\text{dipolar}}}{DdL_y} = \frac{4\pi^2}{T} \left(\frac{g\mu_B}{a^3}\right)^2 \times$$

$$\sum_{q_y,n,n'} nn' \phi_{n,q_y} \phi_{n',-q_y} \int_0^\infty du \frac{\left(1 - e^{-D\sqrt{\left(\frac{u}{d}\right)^2 + q_y^2}}\right) \left[1 + (-1)^{nn'+1} \cos(u)\right]}{D\sqrt{\left(\frac{u}{d}\right)^2 + q_y^2} \left(u^2 - n^2\pi^2\right) \left(u^2 - n'^2\pi^2\right)}.$$
(2.20)

A integral acima não pode ser resolvida analiticamente. Contudo, como nosso objetivo é estudar as principais características físicas do sistema, podemos lançar mão de uma aproximação conveniente. Primeiramente, resolvendo numericamente a integral acima, nota-se que a contribuição dos termos cruzados $n \neq n'$ é muito menor que a contribuição dos termos diretos n = n'. Assim, consideramos apenas a contribuição destes últimos para a soma acima. O integrando em questão pode ser visto como o produto de duas funções:

$$K_{n,q_y} = \int_0^\infty du \frac{\left(1 - e^{-D\sqrt{\left(\frac{u}{d}\right)^2 + q_y^2}}\right) \left[1 + (-1)^{n+1} \cos(u)\right]}{D\sqrt{\left(\frac{u}{d}\right)^2 + q_y^2} \left(u^2 - n^2 \pi^2\right)^2} = \int_0^\infty g_{q_y}(u) h_n(u) du \,, \qquad (2.21)$$

com:

$$g_{q_y}(u) = \frac{\left(1 - e^{-D\sqrt{\left(\frac{u}{d}\right)^2 + q_y^2}}\right)}{D\sqrt{\left(\frac{u}{d}\right)^2 + q_y^2}}$$
$$h_n(u) = \frac{\left[1 + (-1)^{n+1}\cos(u)\right]}{\left(u^2 - n^2\pi^2\right)^2}.$$
(2.22)

A figura 2.9 apresenta os gráficos dessas funções para o caso especial n = 4. Vê-se claramente que $h_4(u)$ tem um máximo bastante pronunciado para $u \approx 4\pi$. De maneira geral, observamos que a função $h_n(u)$ apresenta sempre um máximo pronunciado, o qual se localiza próximo de $n\pi$, sendo que esta aproximação torna-se mais precisa quanto maior for o valor de n. Assim,



Figura 2.9. Gráficos de $g_{q_y}(x)$, em unidades de $g_{q_y}(0)$, em função de $x = D\sqrt{\left(\frac{u}{d}\right)^2 + q_y^2}$ (à esquerda) e de $h_4(u)$, em unidades de $h_4(4\pi)$, em função de πu (à direita). As funções são definidas por (2.22).

podemos fazer a aproximação:

$$K_{n,q_y} \approx g_{q_y}(n\pi) \int_0^\infty h_n(u) du = \frac{\left(1 - e^{-D\sqrt{\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2 + q_y^2}}\right)}{D\sqrt{\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2 + q_y^2}} \times \frac{1}{4\pi n^2}.$$
 (2.23)

O primeiro termo de correção não nulo a esta aproximação é de segunda ordem na derivada de $g_{q_y}(u)$. A existência de um máximo pronunciado na função $h_n(u)$ fornece mais um argumento em favor de se desprezar os termos cruzados $n \neq n'$ na soma original (2.20). Uma análise mais apurada da aproximação (2.23) indica que os erros cometidos, em geral, são menores que 20%, exceto no caso em que q_y se anula ao mesmo tempo em que n assume valores pequenos, o que ocasiona erros um pouco mais significativos. Desse modo, aproximamos a densidade de energia dipolar por:

$$f_{\rm dipolar} = \frac{1}{T} \left(\frac{g\mu_B}{a^3}\right)^2 \sum_{n,q_y} \phi_{n,q_y} \frac{\pi \left(1 - e^{-D\sqrt{\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2 + q_y^2}}\right)}{D\sqrt{\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2 + q_y^2}} \phi_{n,-q_y} \,. \tag{2.24}$$

Portanto, combinando (2.10) e (2.24), escrevemos a densidade de energia total do bloco como:

$$f_{\text{total}} = \sum_{n,q_y} \phi_{n,q_y} \left[f(q) + \left(\frac{T - T_c}{4a^3 T} \right) \right] \phi_{n,-q_y} + \frac{T_c}{96a^3 T} \sum_{\{n_i\},\{q_i\}} \phi_{\{n_1,n_2,n_3\},-q_1-q_2-q_3} \phi_{n_1,q_1} \phi_{n_2,q_2} \phi_{n_3,q_3} , \qquad (2.25)$$

em que:

$$f(q) = \frac{Jq^2}{4aT} + \frac{\pi}{T} \left(\frac{g\mu_B}{a^3}\right)^2 \frac{\left(1 - e^{-qD}\right)}{qD}.$$
 (2.26)

Nas expressões anteriores, introduzimos a notação q para identificar o módulo do vetor de

onda do parâmetro de ordem no espaço de Fourier - também denominado de momento do parâmetro de ordem:

$$q = \sqrt{\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2 + q_y^2}.$$
(2.27)

Se tomássemos a expressão (2.25) no limite $d \to \infty$, associando a variável contínua q_x a $\frac{n\pi}{d}$, chegaríamos à mesma expressão obtida por Garel e Doniach em [6] para o caso de um bloco infinito, conforme esperado. A função f(q) possui as mesmas características gerais da função g(q) apresentada em (1.7) e discutida na seção 1.1: enquanto o primeiro termo, oriundo da interação de troca, favorece configurações sem paredes de domínio (q = 0), o segundo termo, advindo da interação dipolar, tende a dividir o sistema no maior número possível de domínios $(q \to \infty)$. Assim, f(q) possui um mínimo para um valor finito do vetor de onda, $q_0 \neq 0$. Considerando que $q_0 D \gg 1$, ou seja, que o período da modulação é muito menor que a espessura do bloco, podemos desprezar o termo e^{-qD} na expansão em série de Taylor da função f(q), obtendo:

$$f(q) = \frac{3T_c}{2a^3} \left(\frac{\pi g^4 \mu_B^4}{16D^2 a^4 T_c^2}\right)^{1/3} + \frac{3T_c}{32a} \left(q - q_0\right)^2, \qquad (2.28)$$

com:

$$q_0 = \frac{1}{a} \left(\frac{16\pi g^2 \mu_B^2}{T_c D a^2} \right)^{1/3} . \tag{2.29}$$

Agora, substituindo esta expressão na densidade de energia total (2.25) e voltando para o espaço real através da fórmula dos coeficientes de Fourier (2.9), podemos expressar da seguinte forma o funcional que fornece a energia do sistema para uma configuração qualquer dos spins $\phi(x, y)$:

$$\mathcal{H}[\phi] = \frac{1}{2} \int d^2 x d^2 x' \phi\left(\vec{x}\right) G_0^{-1}\left(\vec{x}, \vec{x}'\right) \phi\left(\vec{x}'\right) + \frac{u}{4} \int d^2 x \phi^4\left(\vec{x}\right) \,, \tag{2.30}$$

em que:

$$G_0^{-1}(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{1}{\pi d} \sum_{n>0} \int dq_y \ G_{n,q_y}^{(0)}{}^{-1} \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) \sin\left(\frac{n\pi x'}{d}\right) e^{iq_y(y-y')}$$

$$G_{n,q_y}^{(0)} = \frac{1}{\tau_0 + c \left(q - q_0\right)^2},$$
(2.31)

sendo que os parâmetros "macroscópicos" são escritos em termos dos parâmetros microscópicos do sistema como:

$$\tau_0 = \frac{(T - T^*) D}{a^3 T}, \quad c = \frac{3DT_c}{8aT}, \quad u = \frac{DT_c}{3a^3 T}, \quad T^* = T_c \left[1 - 6 \left(\frac{\pi g^4 \mu_B^4}{16D^2 a^4 T_c^2} \right)^{1/3} \right].$$
(2.32)

Na expressão (2.30), as integrações devem ser subentendidas como limitadas às dimensões do bloco finito, isto é:



Figura 2.10. Superfície de mínima energia, no espaço de momentos, referente à Hamiltoniana de um ferromagneto dipolar de Ising na forma de um bloco de dimensões finitas. A semi-elipse somente compreende um ponto no qual $q_y = 0$ (ausência de modulação na direção \hat{y}) quando a largura do bloco for comensurável ao período de modulação, $\frac{q_0d}{\pi} \in \mathbb{Z}$. A superfície referente ao bloco infinito foi apresentada na figura 1.3.

$$\int d^2x = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^d dx dy \,. \tag{2.33}$$

A Hamiltoniana (2.30) é análoga à de Brazovskii, equação (1.26), com a diferença de que uma das suas dimensões é restrita, tornando-a, portanto, sem simetria por translações espaciais arbitrárias. Uma das conseqüências disto é a necessidade de se usar transformadas de Fourier "finitas", como em (2.9), já que uma das componentes do vetor de onda é discreta. Além disso, a superfície de mínima energia no espaço de momentos não é mais o círculo contínuo mostrado na figura 1.3, mas sim uma semi-elipse pontilhada, apresentada na figura 2.10. Assim, nota-se uma diminuição no espaço disponível para as excitações de menor energia atuarem. O que investigaremos nas próximas seções é se, mesmo com essa redução do espaço de momentos, as flutuações são capazes de induzir uma transição de primeira ordem.

2.3. Solução de campo médio auto-consistente: diagrama de fases

Para obtermos uma descrição satisfatória do diagrama de fases previsto pela Hamiltoniana (2.30), referente ao caso de um bloco finito, aplicaremos os princípios do método de Hartree auto-consistente apresentado na seção 1.3. Decompondo novamente o campo no seu valor médio mais flutuações, $\phi = \langle \phi \rangle + \psi$, e seguindo os mesmos passos e aproximações delineados naquela seção, chegamos à mesma equação auto-consistente para a função de correlação G no espaço real (1.32):

$$G^{-1}(\vec{x}, \vec{x}') = G_0^{-1}(\vec{x}, \vec{x}') + 3uG(\vec{x}, \vec{x})\,\delta(\vec{x} - \vec{x}') + 3u\langle\phi(\vec{x})\rangle^2\,\delta(\vec{x} - \vec{x}') \,. \tag{2.34}$$

A diferença em relação à seção 1.3 reside no fato de as transformadas de Fourier das quantidades envolvidas referirem-se a um espaço finito, de acordo com as expressões (2.7), (2.9) e com as relações de ortogonalidade (2.8). A aplicação desta "transformada de Fourier finita" à equação anterior resulta em um cálculo longo, porém direto, que fornece a seguinte equação auto-consistente, no espaço de momentos:

$$\begin{aligned} G_{n,q_y}^{-1} &= G_{n,q_y}^{(0)}{}^{-1} + \frac{3u}{2} \langle G \rangle + \frac{3u}{4} \langle G \rangle_n + \frac{9u}{4} \sum_{p_y} \langle \phi \rangle_{n,p_y} \langle \phi \rangle_{n,-p_y} - \frac{3u}{4} \sum_{p_y} \langle \phi \rangle_{n,p_y} \langle \phi \rangle_{3n,-p_y} \\ &+ \frac{3u}{4} \sum_{m \neq n,p_y} \langle \phi \rangle_{m,p_y} \left[2 \langle \phi \rangle_{m,-p_y} - \langle \phi \rangle_{m+2n,-p_y} + \langle \phi \rangle_{2n-m,-p_y} - \langle \phi \rangle_{m-2n,-p_y} \right] (2.35) \end{aligned}$$

em que:

$$\langle G \rangle_n = \frac{1}{\pi d} \int dq_y G_{n,q_y}$$

$$\langle G \rangle = \sum_n \langle G \rangle_n .$$

$$(2.36)$$

A equação de estado é obtida seguindo-se novamente os passos da seção 1.3. No espaço real, ela assume a mesma expressão de antes:

$$h(\vec{x}) = \int d^2 r' G_0^{-1}(\vec{x}, \vec{x}') \langle \phi(\vec{x}') \rangle + u \langle \phi(\vec{x}) \rangle^3 + 3u \langle \phi(\vec{x}) \rangle G(\vec{x}, \vec{x}) .$$
(2.37)

Já no espaço de momentos, após outro cálculo longo, porém direto, chegamos à fórmula:

$$h_{n,q_y} = G_{n,q_y}^{-1} \langle \phi \rangle_{n,q_y} + \frac{u}{4} \sum_{m,m',p_y,p'_y} \langle \phi \rangle_{m,p_y} \langle \phi \rangle_{m',p'_y} \langle \phi \rangle_{\{m,m',n\},q_y-p_y-p'_y} - \frac{9u}{4} \langle \phi \rangle_{n,q_y} \sum_{p_y} \langle \phi \rangle_{n,p_y} \left(\langle \phi \rangle_{n,-p_y} - \frac{1}{3} \langle \phi \rangle_{3n,-p_y} \right) - \frac{3u}{4} \langle \phi \rangle_{n,q_y} \sum_{m \neq n,p_y} \langle \phi \rangle_{m,p_y} \left[2 \langle \phi \rangle_{m,-p_y} - \langle \phi \rangle_{m+2n,-p_y} + \langle \phi \rangle_{2n-m,-p_y} - \langle \phi \rangle_{m-2n,-p_y} \right] - \frac{3u}{4} \langle G \rangle_{3n} \langle \phi \rangle_{3n,q_y} + \frac{3u}{4} \sum_{m \neq n} \langle G \rangle_m \left(- \langle \phi \rangle_{n+2m,q_y} + \langle \phi \rangle_{2m-n,q_y} - \langle \phi \rangle_{n-2m,q_y} \right) , (2.38)$$

em que estamos usando a notação (2.11) para o termo $\langle \phi \rangle_{\{m,m',n\},q_y-p_y-p'_y}$. As equações (2.35) e (2.38) representam a solução de campo médio auto-consistente da Hamiltoniana do bloco finito (2.30). Para que possamos aplicá-la aos casos específicos da fase de listras e da fase tipo bolhas, precisamos calcular o termo $\langle G \rangle$ que aparece na equação auto-consistente da função de correlação (2.35). Para isso, a exemplo do que foi feito na seção 1.3, assumimos que a forma da função de correlação seja semelhante à expressão não-interagente $G_{n,q_y}^{(0)}$:

$$G_{n,q_y} = \frac{1}{\tau + c \left(q - q_0\right)^2},$$
(2.39)



Figura 2.11. Casca de espessura $\Lambda = 2\pi/a$ ao redor da superfície de mínima energia da Hamiltoniana do bloco finito, usada para efetuar a soma e a integração em $\langle G \rangle$ (2.36).

em que $\tau = \xi^{-2}$, sendo que ξ denota o comprimento de correlação do sistema. Portanto, como a função de correlação possui um pico bastante pronunciado em $q = q_0$, podemos restringir o intervalo de integração de (2.36) à casca de espessura $\Lambda = 2\pi/a$ ao redor da semi-elipse pontilhada no espaço de momentos, conforme indicado na figura 2.11. Além disso, como o integrando é par em q_y , podemos fazer a mudança de variável $q_y = \sqrt{q^2 - \left(\frac{n\pi}{d}\right)^2}$ e aproximar o elemento de integração por:

$$dq_y = \frac{qdq}{\sqrt{q^2 - \left(\frac{n\pi}{d}\right)^2}} \approx \frac{q_0 dq}{\sqrt{q_0^2 - \left(\frac{n\pi}{d}\right)^2}},$$
(2.40)

de modo que:

$$\langle G \rangle = \frac{1}{\pi d} \sum_{n=1}^{N(q_0 d/\pi)} \frac{2q_0}{\sqrt{q_0^2 - \frac{n^2 \pi^2}{d^2}}} \int_{q_0 - \Lambda}^{q_0 + \Lambda} \frac{dq}{\tau + c (q - q_0)^2} \langle G \rangle = \frac{4q_0}{\pi \sqrt{c} \sqrt{\tau}} \sum_{n=1}^{N(q_0 d/\pi)} \frac{1}{\sqrt{\frac{q_0^2 d^2}{\pi^2} - n^2}}.$$
 (2.41)

Nesta última passagem, utilizamos a aproximação $\xi \gg a$, além de introduzirmos a notação $N(q_0d/\pi)$ para denotar o número inteiro mais próximo de q_0d/π . Portanto, a solução auto-consistente está completa e pronta para ser aplicada às fases de interesse.

2.3.1. Fase de listras

O nome "fase de listras" pode se tornar ambíguo neste contexto, já que listras propriamente ditas só podem ser formadas se a modulação se der unicamente ao longo do eixo x, devido às condições de contorno impostas. Usamos o nome listras para traçar um paralelo com o caso do bloco infinito - isto é, o modelo de Brazovskii da seção 1.3 - já que se trata da fase com



Figura 2.12. Representação da fase de listras no espaço de momentos, referente ao caso do bloco finito: ela corresponde à escolha de dois pontos da semi-elipse com mesmos valores de n, mas valores de q_y opostos.

modulação mais simples que o sistema pode formar em qualquer situação, como esquematizado na figura 2.12:

$$\langle \phi \rangle_{n,q_y} = A \delta_{n,n_0} \left(\delta_{q_y,q_{0y}} + \delta_{q_y,-q_{0y}} \right) \langle \phi \left(\vec{x} \right) \rangle = 2A \sin \left(\frac{n_0 \pi x}{d} \right) \cos \left(q_{0y} y \right) .$$
 (2.42)

Como comparação, a figura 2.13 mostra as estruturas geométricas correspondentes à fase de listras "genuína" e à fase de listras descrita pela equação (2.42). Fica claro que, enquanto a primeira apresenta uma modulação unidimensional, a segunda é modulada tanto na direção finita x quanto na direção infinita y. Daqui por diante, denotamos de q_0 o momento cujas componentes são $\frac{n_0\pi}{d}$ e q_{0y} . Substituindo (2.42) nas equações auto-consistente (2.35) e de estado (2.38), obtemos:

$$\tau = \tau_0 + \frac{\Gamma_{n_0} u}{\sqrt{\tau}} + \frac{9}{2} u A^2$$

$$h = \tau A - \frac{9}{4} u A^3,$$
(2.43)

com:

$$\Gamma_{n_0} = \frac{6q_0}{\pi\sqrt{c}} \sum_{m=1}^{N(q_0d/\pi)} \frac{\left(1 + \frac{\delta_{m,n_0}}{2}\right)}{\sqrt{\frac{q_0^2d^2}{\pi^2} - m^2}}.$$
(2.44)

Impondo a condição de equilíbrio h = 0, obtemos o valor da amplitude do parâmetro de ordem A, e, conseqüentemente, a equação auto-consistente para $\tau_A = \xi^{-2}$:


Figura 2.13. Padrões geométricos representados pelas curvas de nível da fase de listras "genuína" (gráfico à esquerda) e da fase de listras do bloco finito (gráfico à direita). Devido às condições de contorno, a fase "genuína" sempre pode aparecer no caso do bloco infinito, enquanto que, no bloco finito, ela só ocorre se a modulação se der exclusivamente ao longo da direção \hat{x} .

$$-\tau_A = \tau_0 + \frac{\Gamma_{n_0} u}{\sqrt{\tau_A}} \,. \tag{2.45}$$

Logo, obtemos a mesma equação algébrica do caso de um bloco infinito. A transição entre a fase desordenada e a ordenada deve ser de primeira ordem, a exemplo daquele caso, já que o comprimento de correlação nunca diverge de acordo com a equação anterior, pois $\tau_A \neq 0$. Portanto, mesmo com a redução do espaço de momentos devido às condições de contorno do bloco finito, as flutuações do parâmetro de ordem ainda são fortes o suficiente para induzir uma transição de primeira ordem. Além disso, a fase de listras só pode surgir como um estado metaestável do sistema para temperaturas abaixo da espinodal $\tau_0^{(esp)} \approx -1.89\bar{\tau}_{n_0}$, em que definimos a temperatura de referência $\bar{\tau}_{n_0} = (u\Gamma_{n_0})^{2/3}$. É importante salientar que, no caso do bloco finito, a espinodal depende da largura do bloco d e do número de modulações n_0 ao longo da direção x através de Γ_{n_0} (2.44). Tal fato é um reflexo da quebra de simetria por translações arbitrárias ao longo da direção x devido às condições de contorno de Dirichlet.

Pela geometria da superfície de mínima energia no espaço de momentos, representada na figura 2.12, fica claro que a fase de listras (2.42) só pode surgir para $\frac{q_0d}{\pi} \ge n_0$; caso contrário, a semi-elipse não compreende o ponto com coordenada n_0 . Assim, a largura do bloco está intimamente ligada aos tipos de modulações possíveis de serem observadas. Pode-se interpretar esta fase, caracterizada por uma modulação de $\frac{n_0\pi}{d}$ na direção \hat{x} , como correspondente a uma estrutura com n_0 domínios magnéticos "espalhados" ao longo do eixo x, já que, a cada período, a magnetização alterna de sinal contínua e suavemente, sem paredes abruptas (este é o chamado limite de fraca segregação para sistemas modulados).

Para descrevermos o estado desordenado, basta substituir A = 0 em (2.43), donde resulta a equação auto-consistente:

$$\tau = \tau_0 + \frac{\Gamma_{n_0} u}{\sqrt{\tau}} \,, \tag{2.46}$$

a qual também é equivalente ao caso do bloco infinito. Portanto, a fase desordenada é um estado de equilíbrio metaestável do sistema para qualquer temperatura. A diferença de energia livre $\Delta F = F_{listras} - F_{desord}$ entre as duas fases é obtida usando-se o mesmo artifício empregado na seção 1.3, isto é:

$$\Delta F = \int_0^A \frac{dF}{dA'} dA' = \int_\tau^{\tau_A} \left(\sum_{n,q_y} \frac{\delta F}{\delta \langle \phi \rangle_{n,q_y}} \frac{d \langle \phi \rangle_{n,q_y}}{dA} \right) \frac{dA}{d\tau'} d\tau' \,. \tag{2.47}$$

Definindo novamente as variáveis adimensionais:

$$\rho_{(A,0)} \equiv \frac{\tau_{(A,0)}}{\left(u\Gamma_{n_0}\right)^{2/3}} = \frac{\tau_{(A,0)}}{\bar{\tau}_{n_0}}, \qquad (2.48)$$

chegamos ao resultado:

$$\Delta F = \frac{2 \left(u \Gamma_{n_0}^4 \right)^{1/3}}{9} \left[-\frac{\rho_A^2}{2} - \frac{\rho^2}{2} - \sqrt{\rho} + \sqrt{\rho_A} \right] \,. \tag{2.49}$$

Da definição de Γ_{n_0} , equação (2.44), fica claro que esta quantidade diverge toda vez que a condição

$$\frac{q_0 d}{\pi} \in \mathbb{Z} \tag{2.50}$$

for satisfeita. Tal fato poderia nos levar a pensar que a diferença de energia ΔF_f também diverge; contudo, como observado antes, a espinodal também é proporcional a Γ_{n_0} , de modo que, toda vez que a temperatura for maior que $\tau_0^{(esp)}$, não faz sentido definir a diferença de energia, pois a fase modulada não seria nem ao menos metaestável. Logo, a própria espinodal previne a energia livre de apresentar singularidades. A figura 2.14 apresenta a diferença de energia livre entre as fases ordenada e desordenada em função da largura do bloco para duas temperaturas diferentes. Nota-se a presença de barreiras de energia nas proximidades dos pontos em que a condição (2.50) é satisfeita, de maneira que, conforme a temperatura diminui, as barreiras tornam-se mais estreitas e uniformes. Assim, concluímos que transições de fases podem ser atingidas não apenas por variações na temperatura, mas também por variações na largura do bloco.

Outro aspecto interessante da diferença de energia livre (2.49) é sua dependência em relação ao número de domínios n_0 da fase modulada ao longo da direção \hat{x} , devido à presença do fator Γ_{n_0} . Dessa maneira, as flutuações do parâmetro de ordem, levadas em conta pela solução auto-consistente, quebram a degenerescência entre as diferentes fases moduladas possíveis de serem criadas a partir da semi-elipse pontilhada 2.12, fato inexistente no caso de um bloco infinito. Em particular, essa quebra de degenerescência está relacionada apenas à coordenada n, refletindo a perda de simetria por translações na direção \hat{x} devido às condições de contorno impostas. A figura 2.15 compara as diferenças de energia livre referentes aos estados modulados com $n_0 = 1$ domínio e $n_0 = 2$ domínios; de maneira geral, observa-se que a fase com menor modulação é a mais estável. Conforme a largura d do bloco aumenta, fica claro que ambas as fases têm energias muito próximas, o que está de acordo com o esperado para o limite de um bloco infinito ($d \to \infty$), no qual não há simetrias translacionais quebradas.

É importante analisar o caso em que listras comensuráveis podem ser formadas, isto é,



Figura 2.14. Diferença de energia livre ΔF entre a fase de listras com um domínio na direção \hat{x} $(n_0 = 1)$ e a fase desordenada em função de $\frac{q_0 d}{\pi}$. No gráfico à esquerda, a temperatura do sistema é maior que no gráfico à direita. As regiões sombreadas indicam que o estado ordenado não é metaestável (temperatura acima da espinodal), de modo que não faz sentido definir a diferença de energia livre.



Figura 2.15. Diferenças de energia livre ΔF referentes à fase de listras com um domínio na direção \hat{x} $(n_0 = 1, \text{ curva contínua})$ e à fase com dois domínios $(n_0 = 2, \text{ curva tracejada})$ em função de $\frac{q_0 d}{\pi}$.

configurações para as quais a largura do bloco é um múltiplo do período da modulação. Neste caso, o valor médio do parâmetro de ordem é dado por:

$$\langle \phi \rangle_{n,q_y} = A \delta_{n,n_0} \delta_{q_y,0} \langle \phi \left(\vec{x} \right) \rangle = A \sin \left(\frac{n_0 \pi x}{d} \right) ,$$
 (2.51)

ou seja, há apenas modulação ao longo da direção \hat{x} . É claro que isso só pode ocorrer quando a condição (2.50) for satisfeita, ou seja, para valores bastante específicos da largura do bloco. Neste caso, as equações auto-consistente e de estado assumem novas formas:

$$\tau = \tau_0 + \frac{\Gamma_{n_0} u}{\sqrt{\tau}} + \frac{9}{4} u A^2$$

$$h = \tau A - \frac{3}{2} u A^3,$$
(2.52)

de modo que, na condição de equilíbrio (h = 0), a equação auto-consistente fica dada por:

$$-\frac{\tau_{A'}}{2} = \tau_0 + \frac{\Gamma_{n_0} u}{\sqrt{\tau_{A'}}}.$$
(2.53)

Usando a fórmula (2.47), obtemos a diferença de energia entre a fase de listras comensuráveis e a fase desordenada:

$$\Delta F' = \frac{2 \left(u \Gamma_{n_0}^4 \right)^{1/3}}{9} \left[-\frac{\rho_{A'}^2}{4} - \frac{\rho^2}{2} - \sqrt{\rho} + \sqrt{\rho_{A'}} \right], \qquad (2.54)$$

em termos das variáveis adimensionais (2.48). A figura 2.16 compara as diferenças de energia referentes à fase de listras geral, equação (2.42), e à fase de listras comensuráveis, equação (2.51), que só pode aparecer quando $\frac{q_0d}{\pi}$ for um número inteiro. Notamos que esta última é sempre mais estável que a primeira, além de possuir uma espinodal ligeiramente maior, $\tau_0^{(esp)} \approx -1.5\bar{\tau}_{n_0}$. Portanto, conclui-se que, sempre que o sistema puder ser dividido em listras sem modulação na direção infinita \hat{y} , ele o fará, em detrimento das "listras" com modulações em ambas as direções.

2.3.2. Fase tipo bolhas

A exemplo da sub-seção anterior, usamos o nome bolhas não para descrever o padrão geométrico exato da fase considerada, mas para fazer comparações com o caso da fase tipo bolhas do bloco infinito, descrita pela equação (1.10). Como é impossível tomar três vetores englobados pela semi-elipse pontilhada cuja soma seja nula, definimos a fase do tipo bolhas para o bloco finito escolhendo quatro vetores de acordo com o esquema da figura 2.17:

$$\langle \phi \rangle_{n,q_y} = A \left(\delta_{n,n_0} \delta_{q_y,q_{0y}} + \delta_{n,n_0} \delta_{q_y,-q_{0y}} + \delta_{n,n_0+1} \delta_{q_y,q_{1y}} + \delta_{n,n_0+1} \delta_{q_y,-q_{1y}} \right)$$

$$\langle \phi \left(\vec{x} \right) \rangle = A \sin \left(\frac{n_0 \pi x}{d} \right) \cos \left(q_{0y} y \right) + A \sin \left(\frac{(n_0+1) \pi x}{d} \right) \cos \left(q_{1y} y \right) .$$

$$(2.55)$$



Figura 2.16. Diferenças de energia livre ΔF referentes à fase de listras geral (curva contínua) e à fase de listras comensuráveis (pontos vermelhos) em função de $\frac{q_0d}{\pi}$. Estas últimas não são moduladas na direção infinita \hat{y} e só podem aparecer quando $\frac{q_0d}{\pi}$ for um número inteiro. Ambas as fases possuem um domínio na direção \hat{x} ($n_0 = 1$).



Figura 2.17. Representação da fase tipo bolhas no espaço de momentos, referente ao caso do bloco finito: ela corresponde à escolha de dois pares de pontos da semi-elipse, com coordenadas n consecutivas entre os pares e coordenadas q_y assumindo valores opostos em cada par.

Esta fase corresponde à segunda combinação mais simples de vetores que repousam sobre a superfície de mínima energia, enquanto o padrão de listras discutido anteriormente reflete a combinação geral mais simples². A figura 2.18 compara a fase de bolhas original do bloco infinito, descrita pela equação (1.10), com esta fase de bolhas do bloco finito, evidenciando a maior complexidade desta última. A exemplo do que foi discutido a respeito da fase de listras, a fase tipo bolhas só pode ocorrer caso a semi-elipse englobe o ponto n_0+1 , ou seja, se $\frac{q_0d}{\pi} \ge n_0+1$.

Substituindo a configuração de bolhas (2.55) nas equações auto-consistente (2.35) e de estado (2.38), obtemos:

 $^{^2}$ A rigor, a configuração mais simples do sistema corresponde à fase de listras comensuráveis. No entanto, como ela só pode ocorrer para valores muito específicos de *d*, ela não é comum a todos os tipos de sistemas.



Figura 2.18. Padrões geométricos representados pelas curvas de nível da fase tipo bolhas original de um bloco infinito (gráfico à esquerda) e da fase tipo bolhas do bloco finito (gráfico à direita). Devido às condições de contorno, a fase original de bolhas nunca ocorre para o bloco finito.

$$\tau = \tau_0 + \frac{\Gamma_{n_0} u}{\sqrt{\tau}} + \frac{15}{2} u A^2$$

$$h = \tau A - \frac{9}{4} u A^3.$$
(2.56)

Usando o valor da amplitude do parâmetro de ordem A resultante da condição de equilíbrio h = 0, reescrevemos a equação auto-consistente como:

$$-\frac{7}{3}\tau_B = \tau_0 + \frac{\Gamma_{n_0}u}{\sqrt{\tau_B}}.$$
 (2.57)

Novamente, a transição entre a fase desordenada e a fase de bolhas é de primeira ordem, já que $\tau_B \neq 0$ sempre. A partir da equação algébrica anterior, determinamos o limite de metaestabilidade da fase de bolhas $\tau_0^{(esp)} \approx -2.51 \bar{\tau}_{n_0}$, que é um pouco menor que a espinodal da fase de listras. Assim, se o sistema fosse resfriado a partir do estado desordenado, esperaríamos obter primeiramente a fase de listras. Uma abordagem de campo médio indicaria que todas as fases moduladas construídas a partir da superfície de mínima energia, figura 2.10, tornar-se-iam estáveis a uma mesma temperatura, constituindo um conjunto de estados degenerados. Portanto, esta quebra de degenerescência do estado de menor energia é uma conseqüência da atuação das flutuações do parâmetro de ordem, e não do tamanho limitado do sistema, já que ela também ocorre no caso do bloco infinito [8].

Através da fórmula (2.47) e da definição das variáveis adimensionais (2.48), obtemos a diferença de energia entre a fase tipo bolhas e o estado desordenado:

$$\Delta F_b = \frac{4 \left(u \Gamma_{n_0}^4 \right)^{1/3}}{15} \left[-\frac{7 \rho_B^2}{6} - \frac{\rho^2}{2} - \sqrt{\rho} + \sqrt{\rho_B} \right].$$
(2.58)

A figura 2.19 compara as diferenças de energia correspondentes às fases de listras e do tipo



Figura 2.19. Diferenças de energia livre ΔF referentes à fase de listras (curva contínua) e à fase tipo bolhas (curva tracejada) em função de $\frac{q_0d}{\pi}$. Ambas são caracterizadas por $n_0 = 1$; as regiões sombreadas indicam que elas não são metaestáveis, de modo que não faz sentido definir a diferença de energia livre.

bolhas. Nota-se que, em ambos os casos, há a presença de barreiras de energia nas vizinhanças dos pontos em que a condição (2.50) é satisfeita. Contudo, o aspecto mais importante que pode ser apreendido da figura é que a energia da fase de listras é menor que a energia da fase tipo bolhas, indicando que aquela é mais estável. De modo geral, isto ocorre não somente para a temperatura considerada no gráfico, mas para qualquer valor de temperatura. Logo, como a espinodal da última é maior que a da primeira, esperamos que ocorram principalmente fases de listras para o bloco finito. É claro que a presença de um campo externo pode alterar bastante este cenário, tornando a fase de bolhas mais estável para certos valores do campo, como ocorre no caso do bloco infinito [6].

Configurações com modulações mais complexas que a fase de bolhas podem ser construídas diretamente a partir da superfície de mínima energia no espaço de momentos; porém, os cálculos também tornam-se mais complexos e mais longos. Da comparação entre as diferentes fases consideradas até o momento, a saber, a de listras geral, a de listras comensuráveis e a do tipo bolhas, notamos que, quanto mais simples o padrão, mais estável é a fase correspondente, a exemplo do que ocorre no caso do bloco infinito. Dessa maneira, esperamos que a fase ordenada mais estável seja a de listras ou, nos casos particulares em que a condição (2.50) for satisfeita, a de listras comensuráveis.

Na literatura, as simulações de ferromagnetos de Ising dipolares são feitas em sistemas finitos, porém com condições de contorno periódicas [57, 58, 59], o que nos impede de fazer uma comparação direta com o presente caso, já que o papel das condições de contorno de Dirichlet é fundamental. Entretanto, alguns aspectos mais gerais podem ser discutidos: por exemplo, nos trabalhos de MacIsaac *et al.* [57, 58], é observado que a fase de listras é mais estável tanto em relação à fase uniforme como em relação à fase tipo tabuleiro de xadrez, que seria o análogo da fase de bolhas para o caso de um sistema com uma rede cristalina quadrada subjacente³. Além disso, as simulações também indicam que o período da modulação cresce conforme a razão entre as interações de troca e dipolar aumenta, de acordo com o comportamento qualitativo sugerido pela equação (2.29). A grande diferença em relação aos resultados apresentados aqui é que estes autores também observam uma outra fase entre a de listras e a desordenada com simetria

³ Em geral, as simulações não se referem ao limite do contínuo, como o presente modelo, mas dependem da estrutura cristalina considerada.

semelhante à da rede subjacente e sem ordem orientacional de longo alcance, chamada fase tetragonal. O motivo dessa diferença pode estar não só no fato de termos usado condições de contorno do tipo Dirichlet, mas também por estarmos no limite do contínuo, em que a simetria da rede subjacente é "invisível".

Outra fase observada em trabalhos numéricos [59] e teóricos [43] que não aparece no atual modelo é a fase nemática, que apresenta ordem orientacional, mas não posicional. A principal razão de não a observarmos aqui é não termos levado em conta o papel das excitações elásticas e dos defeitos topológicos, conforme explicado durante a seção 1.4. De qualquer modo, vale notar que, no caso do bloco finito, as flutuações elásticas são menos fortes devido à finitude do sistema, o que impede a divergência do fator de Debye-Waller. Além disso, a finitude do sistema introduz um tamanho máximo para os defeitos topológicos, podendo inclusive alterar a dinâmica da transição por desligamento dos pares com cargas topológicas opostas. Por fim, vale mencionar que a presença de um campo cristalino suficientemente forte poderia estabilizar a ordem translacional para um certo intervalo de temperaturas, garantindo a integridade da fase de listras.

2.4. Aplicação aos filmes finos de MnAs:GaAs

Podemos aplicar o formalismo desenvolvido nas seções anteriores diretamente ao caso dos filmes finos de MnAs:GaAs para descrever a estrutura magnética dos terraços ferromagnéticos. Para isso, além de usarmos o fato de a largura do bloco decrescer com a temperatura de acordo com a relação linear (2.1), é necessário estimarmos os valores das grandezas microscópicas que determinam os parâmetros da Hamiltoniana (2.30), τ_0 , $u \in c$, de acordo com as relações (2.32). Como não estamos interessados em uma descrição quantitativa exata, mas nas propriedades físicas mais gerais oriundas dos dois ingredientes principais do modelo - a competição de interações e as condições de contorno de Dirichlet - podemos tomar valores aproximados para estas grandezas, baseados em dados experimentais disponíveis na literatura [47, 48, 49, 50, 51]. Desse modo, no que se segue, consideramos a = 5 Å, g = 3, D = 130 nm e $T_c = 32$ meV.

A primeira estimativa que podemos realizar é a respeito da validade da solução de campo médio auto-consistente. De acordo com o que foi apresentado na seção 1.3, há vários critérios para se decidir sobre a precisão deste método, desde o mais rigoroso⁴ $(u/c^2)^{1/15} \ll 1$, até o menos restritivo $(u/c^2)^{1/6} \ll 1$. Usando os valores estimados, obtemos que $(u/c^2)^{1/15} \approx 0.58 \ (u/c^2)^{1/6} \approx 0.27$, indicando que os resultados obtidos pela abordagem auto-consistente têm um razoável grau de confiabilidade. No que concerne as outras aproximações usadas nos desenvolvimentos anteriores, verificamos que $q_0D \approx 7.4$, o que justifica termos desprezado o termo e^{-qD} na expansão em série de Taylor da densidade de energia total (2.26). Além disso, a temperatura de referência T^* , dada pela última fórmula de (2.32), pode ser aproximada por T_c , isto é, $T^* \approx T_c$. Por fim, sobre a aproximação analítica (2.24) da densidade de energia dipolar (2.20), ela apresenta pequenos desvios em relação à expressão numérica para valores da razão de aspecto d/D > 0.5, desde que nos restrinjamos a momentos próximos de q_0 . Assim, podemos usá-la com bastante segurança no intervalo de temperaturas de interesse.

 $^{^4\,}$ É importante salientar que c=1 na análise da seção 1.3.



Figura 2.20. Diferença de energia livre ΔF entre a fase de listras e a fase desordenada em função da temperatura T (em graus Celsius), referente aos filmes finos de MnAs:GaAs. Os mínimos abruptos referem-se às fases de listras comensuráveis, em que a magnetização não se modula ao longo da direção ilimitada, mas se divide em n_0 domínios ao longo da direção limitada, com $1 \leq n_0 \leq 10$.

Primeiramente, consideremos a formação da fase de listras (2.42) dentro dos terraços ferromagnéticos. Conforme explicado na seção anterior, ela pode ser interpretada como uma estrutura de n_0 domínios na direção \hat{x} com uma modulação de q_{0y} ao longo da direção ilimitada \hat{y} . A figura 2.20 apresenta a diferença de energia livre entre a fase de listras e o estado desordenado para o intervalo de temperaturas correspondente à região de coexistência das fases $\alpha \in \beta$ nos filmes finos de MnAs:GaAs. Notamos que, para todo o intervalo, a fase de listras encontra-se sempre abaixo da temperatura espinodal, confirmando a existência de estruturas magnéticas auto-organizadas dentro dos terraços. Além disso, para temperaturas nas quais a condição $\frac{q_0d}{\pi} \in \mathbb{Z}$ é satisfeita, observamos a presença de mínimos locais de energia correspondentes à formação da fase de listras comensuráveis (2.53) - isto é, sem modulação na direção \hat{y} - com $1 \leq n_0 \leq 10$. Em um sistema experimental, há que se considerar a presença de vários tipos de impurezas na amostra, de modo que os terraços ferromagnéticos não terão todos a mesma largura d para uma certa temperatura T, mas apresentarão uma distribuição de larguras cujo valor médio é dado por (2.1). Assim, esperamos que estes mínimos abruptos sejam substituídos por vales mais suaves.

Outro aspecto importante sobre a diferença de energia livre que não está apresentada explicitamente na figura 2.20 é que, no caso do MnAs:GaAs, as diferenças de energia entre as fases de listras com números de domínios n_0 distintos são praticamente nulas - ou, dito de outra forma, envolvem escalas de energia indistinguíveis experimentalmente. Assim, no início da região de coexistência, a 0 °C, todos os estados contendo de 1 a 10 domínios na direção \hat{x} (e suas correspondentes modulações em \hat{y}) são degenerados. Entretanto, conforme a temperatura aumenta, o sistema atinge o primeiro mínimo, correspondente ao estado sem modulação na direção \hat{y} e com $n_0 = 10$ domínios ao longo da direção limitada. A seguir, todas as listras englobando de 1 a 9 domínios em \hat{x} possuem praticamente a mesma energia livre. Contudo, como o estado anterior possuía 10 domínios, é energeticamente favorável ao sistema que ele quebre apenas um domínio e fique na configuração com $n_0 = 9$, em detrimento de todas as outras possíveis, antes de atingir o mínimo correspondente a 9 domínios sem modulação em \hat{y} , a uma temperatura superior. Dessa maneira, podemos interpretar que, a cada um desses mínimos locais apresentados na figura 2.20, o sistema altera o número de domínios ao longo da direção \hat{x} , até atingir a temperatura $T \approx 45$ °C, na qual a semi-elipse do espaço de momentos



Figura 2.21. Valor médio da modulação da magnetização ao longo da direção ilimitada $\langle q_y \rangle$ (em unidades de 10^{-3}\AA^{-1}) em função da temperatura T do filme fino de MnAs:GaAs (em graus Celsius). Foi considerada uma distribuição Gaussiana de larguras d do terraço, com valor médio dado por (2.1) e desvio padrão de 5% em relação à média.

não engloba mais nenhuma valor inteiro da coordenada n. A partir daí, o estado modulado não é mais possível de ser constituído, e o formalismo anterior perde a sua validade. Uma das possibilidades é que, a partir desta temperatura, surja a fase uniforme, isto é, sem modulação ao longo da direção \hat{x} .

Comparando com os dados obtidos das imagens de MFM e do espalhamento ressonante de raios X, discutidos na seção 2.1, notamos uma concordância qualitativa no regime de temperaturas em que as estruturas do tipo II são observadas - isto é, estruturas nas quais a magnetização aponta na direção \hat{z} . Em [13], foram observadas configurações de 2 e 3 domínios, enquanto em [52] puderam ser notadas configurações com 4 e até mesmo 5 domínios ao longo da direção \hat{x} do terraço (em todos os casos, também é observada uma modulação ao longo da direção ilimitada). De acordo com os nossos resultados, acima de 25 °C, que é aproximadamente a temperatura na qual a magnetização se reorienta, de acordo com [13], formam-se estruturas magnéticas cujo número de domínios varia de 1 a 5, concordando com os resultados experimentais. É importante salientar que este resultado não é devido a nenhuma das aproximações empregadas ao longo do desenvolvimento do modelo, nem a nenhuma especificidade que lhe seja peculiar. Pelo contrário, trata-se de um resultado de caráter mais geral, fruto da natureza das interações competitivas - que geram um mínimo de energia para um valor não-nulo do vetor de onda $q_0 \neq 0$ - e das condições de contorno impostas - que discretizam uma das componentes do vetor de onda.

Uma verificação experimental mais direta do modelo aqui apresentado - e, em particular, da existência dos múltiplos mínimos de energia - poderia ser feita medindo-se a componente q_y do vetor de onda, correspondente à modulação ao longo da direção ilimitada \hat{y} , ao longo da região de coexistência. Tal medida poderia ser feita, por exemplo, através de espalhamento de raios X. Na figura 2.21, apresentamos a previsão do comportamento de $\langle q_y \rangle$ em função da temperatura, considerando o caso mais concreto de terraços obedecendo a uma distribuição Gaussiana de larguras d, com valor médio dado por (2.1) e desvio padrão de 5% em relação à média (uma distribuição Gaussiana também foi considerada em [13]). A existência dos mínimos de energia discutidos anteriormente faz com que a modulação média ao longo da direção \hat{y} apresente oscilações, que se tornam mais fortes à medida em que o número de domínios diminui.



Figura 2.22. Diferenças de energia livre ΔF correspondentes às fases de listras (curva contínua) e tipo bolhas (curva tracejada) em função da temperatura T do filme fino de MnAs:GaAs (em graus Celsius). Os mínimos de energia mostrados na figura 2.20 foram retirados para deixar o gráfico mais claro.

Este resultado inédito é uma previsão importante do nosso modelo e passível de ser verificada em laboratório, sugerindo a realização de novos experimentos.

Quanto à fase tipo bolhas, de acordo com o que discutimos na seção anterior, não é de se esperar que elas sejam observadas. A figura 2.22 compara as diferenças de energia livre referentes à fase de listras e à fase tipo bolhas para o MnAs:GaAs, confirmando claramente que esta última possui uma energia maior que a primeira, e, portanto, não deve ser observada. De fato, nenhuma das imagens de MFM indica sequer remotamente a possibilidade de existirem configurações como a esquematizada na figura 2.18, referente à fase de bolhas; pelo contrário, elas sugerem estruturas muito mais próximas à fase de listras, esquematizada na figura 2.13.

Assim, de um modo geral, podemos dizer que o modelo desenvolvido anteriormente de um parâmetro de ordem escalar obedecendo à Hamiltoniana de Brazovskii e com condições de contorno do tipo Dirichlet captura os principais ingredientes capazes de descrever, ao menos qualitativamente, as complexas estruturas magnéticas auto-organizadas observadas nos terraços ferromagnéticos dos filmes finos de MnAs:GaAs. Para prosseguir no entendimento delas, é necessária a introdução de ingredientes adicionais, como a presença de desordem, os efeitos das excitações topológicas e o caráter vetorial do parâmetro de ordem. Na seqüência, focaremos principalmente neste último item.

2.5. Além da simetria Ising: o modelo XZ

Para sermos capazes de descrever o fenômeno de reorientação magnética observado nos terraços ferromagnéticos, bem como a conseqüente mudança na forma das curvas de histerese (figura 2.6), é necessário considerarmos um parâmetro de ordem vetorial. Como foi explicado anteriormente, no MnAs:GaAs a magnetização não pode apontar na direção \hat{y} devido à presença de um forte campo cristalino. Assim, para todos os efeitos, consideramos um modelo XZ, no qual o spin tem duas componentes $\phi_x(x, y) \in \phi_z(x, y)$. Nosso objetivo inicial é obter a Hamiltoniana de Ginzburg-Landau capaz de descrever a competição entre as interações de troca e dipolar, combinada às condições de contorno de Dirichlet. Na ausência da interação dipolar, é sabido que o modelo XZ em duas dimensões não possui ordem de longo alcance devido às excitações térmicas de ondas de spin - é o chamado teorema de Mermin-Wagner [60]. Contudo, mesmo no caso de um sistema infinito, Maleev mostrou que a interação dipolar é capaz de estabilizar uma fase ordenada [61]. Uma abordagem bastante completa sobre este sistema foi desenvolvida recentemente em [62], a partir da renormalização do modelo σ não-linear modificado pela inclusão da interação dipolar. Neste trabalho, os autores argumentam que os defeitos topológicos (vórtices) não causam efeitos tão dramáticos quanto no sistema XZ "puro", no qual eles induzem uma transição do tipo Kosterlitz-Thouless entre uma fase com ordem de quase-longo alcance e uma fase com ordem de curto alcance apenas. Assim, no que se segue, não consideraremos a presença de vórtices magnéticos no bloco finito.

A interação ferromagnética de troca entre os spins é descrita pela Hamiltoniana microscópica de Heisenberg:

$$H_{\text{Heisenberg}} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \,. \tag{2.59}$$

Aplicando uma transformação de Hubbard-Stratonovich, obtemos a seguinte Hamiltoniana de Ginzburg-Landau (mais detalhes encontram-se no Apêndice B):

$$\mathcal{H}_{\text{troca}} = \int d^3x \left[\frac{J}{2aT} \left| \vec{\nabla} \vec{\varphi} \left(\vec{x} \right) \right|^2 + \frac{2\left(T - T_c\right)}{a^3T} \left(\vec{\varphi} \cdot \vec{\varphi} \right) + \frac{5T_c}{4a^3T} \left(\vec{\varphi} \cdot \vec{\varphi} \right)^2 \right], \qquad (2.60)$$

em que $T_c = Jz/4$ e, a exemplo do caso Ising, definimos o parâmetro de ordem:

$$\vec{\varphi}\left(\vec{x}\right) = \vec{\phi}\left(x,y\right)\theta\left(x\right)\theta\left(d-x\right)\theta\left(D/2-z\right)\theta\left(D/2+z\right) \,. \tag{2.61}$$

Novamente, as condições de contorno de Dirichlet implicam na seguinte expansão do parâmetro de ordem em série de Fourier:

$$\vec{\phi}(x,y) = \sum_{n>0,q_y} \vec{\phi}_{n,q_y} \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) e^{iq_y y}, \qquad (2.62)$$

com:

$$\vec{\phi}_{n,q_y} = \frac{2}{dL_y} \int_0^d \int_{-\infty}^\infty \vec{\phi}\left(x,y\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{d}\right) e^{-iq_y y} dx dy \,. \tag{2.63}$$

Substituindo estas expressões na Hamiltoniana de troca (2.60), obtemos a densidade de energia de troca dentro do bloco:

$$f_{\text{troca}} = \frac{E_{\text{troca}}}{DdL_y} = \sum_{n,q_y} \phi_{n,q_y}^{(i)} \left[\frac{J}{4aT} \left(\frac{n^2 \pi^2}{d^2} + q_y^2 \right) + \left(\frac{T - T_c}{a^3 T} \right) \right] \phi_{n,-q_y}^{(i)} + \frac{5T_c}{64a^3T} \sum_{\{n_i\},\{q_i\}} \phi_{\{n_1,n_2,n_3\},-q_1-q_2-q_3}^{(i)} \phi_{n_1,q_1}^{(i)} \phi_{n_2,q_2}^{(j)} \phi_{n_3,q_3}^{(j)} , \quad (2.64)$$

em que estamos usando novamente a notação (2.11), além da convenção de somar índices sobre-escritos repetidos, referentes às duas componentes do parâmetro de ordem.

2.5. Além da simetria Ising: o modelo XZ

A densidade de energia dipolar do bloco é obtida seguindo os mesmos passos do caso Ising: a magnetização relaciona-se com o parâmetro de ordem vetorial através de:

$$\vec{M}\left(\vec{x}\right) = \left(\frac{g\mu_B}{a^3}\right)\vec{\varphi}\left(\vec{x}\right) \,. \tag{2.65}$$

Portanto, basta substituir $\rho = -\vec{\nabla} \cdot \vec{M}$ na expressão (2.16) para obter a energia de uma configuração arbitrária. O cálculo é trabalhoso, porém direto; a densidade de energia dipolar dentro do bloco pode ser escrita como:

$$f_{\rm dipolar} = \frac{E_{\rm dipolar}}{DdL_y} = \frac{4\pi^2}{T} \left(\frac{g\mu_B}{a^3}\right)^2 \sum_{q_y,n,n'} nn' \left[\phi_{n,q_y}^{(i)} K_{(n,n'),q_y}^{(i)} \phi_{n',-q_y}^{(i)}\right],$$
(2.66)

em que a soma se restringe a $n \in n'$ de mesmas paridades e os kernels são dados por:

$$K_{(n,n'),q_y}^{(x)} = \int_0^\infty du \frac{\left(\frac{u}{d}\right)^2 \left(D\sqrt{\left(\frac{u}{d}\right)^2 + q_y^2} + e^{-D\sqrt{\left(\frac{u}{d}\right)^2 + q_y^2}} - 1\right) \left[1 + (-1)^{nn'+1}\cos(u)\right]}{D\left[\left(\frac{u}{d}\right)^2 + q_y^2\right]^{3/2} (u^2 - n^2\pi^2) (u^2 - n'^2\pi^2)}$$
$$K_{(n,n'),q_y}^{(z)} = \int_0^\infty du \frac{\left(1 - e^{-D\sqrt{\left(\frac{u}{d}\right)^2 + q_y^2}}\right) \left[1 + (-1)^{nn'+1}\cos(u)\right]}{D\sqrt{\left(\frac{u}{d}\right)^2 + q_y^2} (u^2 - n^2\pi^2) (u^2 - n'^2\pi^2)}.$$
(2.67)

Assim como no caso Ising, as integrais não podem ser resolvidas analiticamente. Entretanto, seus integrandos possuem a mesma forma discutida naquele caso, isto é, podem ser fatorados por $g_{q_y}^{(i)}(u)h_n(u)$, em que $g_{q_y}^{(i)}(u)$ é uma função monotônica bem comportada e $h_n(u)$, definida em 2.22, possui um pico bastante pronunciado em $u \approx n\pi$ (ver figura 2.9, por exemplo). Portanto, seguindo os argumentos apresentados naquele caso, podemos aproximar os *kernels* por:

$$K_{(n,n'),q_y}^{(x)} \approx \delta_{n,n'} \frac{\left(D\sqrt{\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2 + q_y^2} + e^{-D\sqrt{\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2 + q_y^2}} - 1\right)}{4\pi n^2 D\sqrt{\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2 + q_y^2}} \left[\frac{\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2}{\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2 + q_y^2}\right]$$

$$K_{(n,n'),q_y}^{(x)} \approx \delta_{n,n'} \frac{\left(1 - e^{-D\sqrt{\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2 + q_y^2}}\right)}{4\pi n^2 D\sqrt{\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2 + q_y^2}},$$
(2.68)

de modo que a densidade de energia dipolar fica sendo dada por:

$$f_{\text{dipolar}} = \frac{\pi}{T} \left(\frac{g\mu_B}{a^3}\right)^2 \sum_{q_y,n,n'} \left\{ \phi_{n,q_y}^{(x)} \frac{\left(qD + e^{-qD} - 1\right)}{qD} \left[\frac{\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2}{q^2}\right] \phi_{n,-q_y}^{(x)} + \phi_{n,q_y}^{(z)} \frac{\left(1 - e^{-qD}\right)}{qD} \phi_{n,-q_y}^{(z)} \right\}$$
(2.69)

Portanto, combinando as densidades de energia (2.64) e (2.69), obtemos a densidade de energia total:



Figura 2.23. Representação tridimensional das funções $f_x(q_x, q_y)$, à esquerda, e $f_z(q_x, q_y)$, à direita, definidas em (2.71), no limite em que a componente $q_x = n\pi/d$ é tratada como uma variável contínua.

$$f_{\text{total}} = \sum_{n,q_y} \left\{ \phi_{n,q_y}^{(x)} \left[f_x(n,q_y) + \left(\frac{T-T_c}{a^3T}\right) \right] \phi_{n,-q_y}^{(x)} + \phi_{n,q_y}^{(z)} \left[f_z(q) + \left(\frac{T-T_c}{a^3T}\right) \right] \phi_{n,-q_y}^{(z)} \right\} + \frac{5T_c}{64a^3T} \sum_{\{n_i\},\{q_i\}} \phi_{\{n_1,n_2,n_3\},-q_1-q_2-q_3}^{(i)} \phi_{n_1,q_1}^{(j)} \phi_{n_2,q_2}^{(j)} \phi_{n_3,q_3}^{(j)}, \qquad (2.70)$$

em que definimos as seguintes funções, representadas na figura 2.23:

$$f_{x}(n,q_{y}) = \frac{Jq^{2}}{4aT} + \frac{\pi}{T} \left(\frac{g\mu_{B}}{a^{3}}\right)^{2} \frac{\left(qD + e^{-qD} - 1\right)}{qD} \left[\frac{\left(\frac{n\pi}{d}\right)^{2}}{q^{2}}\right]$$
$$f_{z}(q) = \frac{Jq^{2}}{4aT} + \frac{\pi}{T} \left(\frac{g\mu_{B}}{a^{3}}\right)^{2} \frac{\left(1 - e^{-qD}\right)}{qD}.$$
(2.71)

As minimizações de energia podem ser feitas independentemente para as duas componentes do parâmetro de ordem. Como era esperado, no caso da componente ϕ_z reobtemos o mesmo resultado do caso Ising, ou seja, esta componente da magnetização apresenta uma configuração ordenada com a modulação típica q_0 dada por (2.29), em acordo com a figura 2.23. Conforme discutido na seção 2.2, o estado de mais baixa energia corresponde à fase de listras com n_0 domínios na direção \hat{x} e modulação q_{0y} na direção \hat{y} , de acordo com as curvas de nível da figura 2.13.

Já no que concerne a componente ϕ_x , a situação é bem diferente e a Hamiltoniana resultante não é descrita pelo modelo de Brazovskii. Para ver isso, consideremos, por um instante, o caso do bloco infinito: a expressão (2.71) permanece com a mesma forma, desde que façamos a associação $q_x \to n\pi/d$. Assim, fica claro que o mínimo de $f_x(q_x, q_y)$ é atingido para $q_x = 0$ e $q_y \to 0$, como ilustra a figura 2.23, significando que o estado ordenado é uniforme, e não modulado. Voltando ao caso do bloco finito, esta configuração com $q_x = 0$ não pode ser estabelecida por causa da discretização da componente q_x . Logo, a energia é minimizada pela configuração que possui o menor valor possível da componente $q_x = n\pi/d$, ou seja, n = 1, fazendo com que o estado mais estável da componente ϕ_x da magnetização seja aquele com um único domínio na direção \hat{x} . Este mínimo também é caracterizado por uma modulação $q_y \neq 0$ na direção \hat{y} que diminui conforme a largura do bloco aumenta, tendendo a zero no limite do bloco infinito.

Portanto, esta descrição concorda qualitativamente com a configuração de domínios do tipo I observada experimentalmente por microscopia de força magnética nos terraços ferromagnéticos dos filmes finos de MnAs:GaAs (ver figura 2.5). Desse modo, a abordagem via Hamiltonianas efetivas de Ginzburg-Landau é capaz de explicar todas as estruturas magnéticas que se formam nestes terraços, a saber: as estruturas tipo I, com a magnetização paralela ao plano do substrato e um único domínio na direção \hat{x} , e as estruturas tipo II, com a magnetização perpendicular ao plano do substrato dividida em 2, 3, 4 e 5 domínios na direção \hat{x} . Contudo, para fazer previsões mais quantitativas a respeito da temperatura de reorientação magnética ou da mudança na forma das curvas de histerese, esta abordagem traz algumas dificuldades e desvantagens. Uma delas reside no fato de os domínios ferromagnéticos previstos por este modelo não serem domínios abruptos, com paredes de Néel ou de Bloch bem definidas, mas sim domínios senoidais, "espalhados", o que impede uma descrição apropriada da rotação deles.

Assim, no que se segue, baseados nos resultados qualitativos fornecidos por este método acerca das configurações de menor energia da magnetização dentro do bloco finito, desenvolvemos um modelo fenomenológico mais fácil de ser manipulado e com o qual podemos fazer previsões diretas sobre a reorientação magnética e a mudança na forma das curvas de histerese, usando como "dados de entrada" apenas os parâmetros microscópicos dos filmes finos de MnAs:GaAs.

2.6. Reorientação magnética e curvas de histerese

Para descrever as curvas de histerese, é desejável uma modelagem que permita estudar as rotações dos domínios magnéticos em função do campo externo aplicado. Já discutimos anteriormente quais são as características qualitativas das estruturas de domínio que minimizam o funcional de energia livre do bloco finito. Assim, estamos em posição de nos restringirmos a uma configuração específica e investigar suas propriedades detalhadamente através da minimização da energia total, incluindo termos mais específicos que não foram levados em conta anteriormente, como, por exemplo, a anisotropia cristalina.

Consideremos, inicialmente, um modelo fenomenológico para descrever os domínios magnéticos correspondentes às estruturas tipo II (ver figura 2.5). Por simplicidade, vamos focar no caso de domínios unidimensionais, isto é, que se estendem somente ao longo do eixo x. Como a magnetização não pode apontar na direção \hat{y} , fica claro que o único tipo de domínio possível de ser formado é o de Néel [53]. Logo, definimos a magnetização através de:

$$\vec{M} = [M_x(x)\hat{x} + M_z(x)\hat{z}]\,\theta\,(D/2 + z)\,\theta\,(D/2 - z)\,, \qquad (2.72)$$

 com^5 :

⁵ Na expressão acima, o uso das funções degrau pode ser justificado no limite de paredes de domínio muito pequenas na direção \hat{z} , isto é, $\sigma_z \rightarrow 0$.



Figura 2.24. Perfis das componentes M_z (gráfico à esquerda) e M_x (gráfico à direita) da magnetização em função de x/d. Esta configuração corresponde a N = 4 domínios unidimensionais de Néel com paredes abruptas $\sigma \ll d$.

$$M_0^2 = M_x^2 + M_z^2$$

$$M_z(x) = M_0 \sum_{i=1}^N \frac{(-1)^{i-1}}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left[-\frac{x - d(i-1)/N}{\sqrt{2}\sigma} \right] - \operatorname{erfc} \left[-\frac{x - di/N}{\sqrt{2}\sigma} \right] \right\}, \quad (2.73)$$

em que $\operatorname{erfc}(x)$ denota a função erro complementar e M_0 , a magnetização de saturação. A escolha da função erro complementar deve-se às suas propriedades geométricas e analíticas, como ficará mais claro adiante. O inteiro N denota o número de domínios ao longo da direção $\hat{x} \in \sigma$ corresponde à largura da parede de domínio, cujo valor é aquele que minimiza a energia total da configuração; novamente, usamos d para denotar a largura do bloco. A figura 2.24 ilustra o perfil de M_z com N = 4 domínios e paredes abruptas, isto é, $\sigma \ll d$; nota-se que a magnetização só não se anula na região aproximada $0 \le x \le d$. No que se segue, assumimos que a condição $\sigma \ll d$ seja satisfeita sempre, isto é, restringimo-nos a paredes de domínio abruptas - em acordo com as imagens de MFM para o MnAs:GaAs. Neste caso, a componente M_x pode ser aproximada por funções Gaussianas:

$$M_x(x) = M_0 \sum_{i=1}^{N-1} e^{-\frac{(x-di/N)^2}{2\sigma^2}}.$$
 (2.74)

O comportamento da componente M_x correspondente ao caso de N = 4 domínios é também apresentado na figura 2.24, evidenciando sua forma aproximadamente Gaussiana. O valor de σ é obtido minimizando-se a energia total da configuração, como explicado em detalhes no Apêndice C.

Para descrever a reorientação magnética e as curvas de histerese dos spins do bloco finito, é necessário permitir que a configuração (2.73)-(2.74) rotacione em relação ao eixo z, de modo que possamos obter, a partir de uma única expressão, tanto a estrutura de domínios tipo II quanto a tipo I - na qual a magnetização aponta na direção \hat{x} . Para isso, introduzimos a configuração mais geral:

$$M_{x}(x) = M_{0} (1 - \sin \theta) \sum_{i=1}^{N-1} e^{-\frac{(x - di/N)^{2}}{2\sigma^{2}}} + M_{0} \frac{\sin \theta}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left[-\frac{x}{\sqrt{2}\sigma} \right] - \operatorname{erfc} \left[-\frac{x - d}{\sqrt{2}\sigma} \right] \right\},$$

$$M_{z}(x) = M_{0} \cos \theta \sum_{i=1}^{N} \frac{(-1)^{i-1}}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left[-\frac{x - d(i-1)/N}{\sqrt{2}\sigma} \right] - \operatorname{erfc} \left[-\frac{x - di/N}{\sqrt{2}\sigma} \right] \right\}$$
(2.75)

em que θ denota o ângulo que a magnetização faz com o eixo z. Fica claro que, para $\theta = 0$, reobtemos a configuração discutida anteriormente (tipo II), enquanto que $\theta = \pi/2$ fornece um monodomínio com a magnetização paralela ao eixo x (tipo I). A energia total da configuração (2.75) compreende a contribuição de quatro termos: a energia de troca, a energia dipolar magnetostática, a energia de anisotropia cristalina uniaxial e a energia devido ao acoplamento com o campo magnético.

Para se obter o termo de troca, é necessário assumir uma simetria cristalina subjacente; a exemplo do que fizemos anteriormente, escolhemos uma rede cúbica cujo parâmetro de rede denotamos por *a*. Assim, a magnetização de saturação fica dada por $M_0 = g\mu_B/a^3$, e a energia de troca, por:

$$E_{\text{troca}} = \frac{J}{2a} \int d^3x \left[\left| \vec{\nabla} m_x \left(\vec{x} \right) \right|^2 + \left| \vec{\nabla} m_z \left(\vec{x} \right) \right|^2 \right] \,, \tag{2.76}$$

em que $\vec{m} = \vec{M}/M_0$. Já a energia dipolar é obtida, novamente, através da fórmula (2.16), com $\rho = -\vec{\nabla} \cdot \vec{M}$. O termo referente à anisotropia cristalina reflete o fato de uma das direções de magnetização ser mais "fácil" que a outra. Sua origem microscópica remete à deformação da nuvem eletrônica dos átomos magnéticos pela interação tipo dipolo induzido com os átomos dos sítios vizinhos. Conseqüentemente, o momento angular orbital dos elétrons desses átomos adquire um caráter anisotrópico, passando a apontar em certas direções preferenciais. Assim, por causa da interação spin-órbita, os momentos magnéticos dos elétrons também apontam nessas mesmas direções, definidas pela simetria da rede subjacente. A aproximação mais simples consiste em assumir uma anisotropia cristalina uniaxial, cuja contribuição para a energia total é dada por [53]:

$$E_{\rm cristalina} = -\Delta K \int d^3 x m_x^2 \,, \qquad (2.77)$$

em que ΔK , a constante de anisotropia, pode ser positiva ou negativa, dependendo se o eixo x for o eixo fácil ou o difícil, respectivamente. Por fim, há que se considerar o termo:

$$E_{\rm campo} = -\vec{h} \cdot \vec{M} \,, \tag{2.78}$$

que surge devido à presença de um campo magnético externo. Para fazer contato com as medidas experimentais acerca dos filmes de MnAs:GaAs, tomamos a direção do campo paralela ao eixo \hat{x} , isto é, $\vec{h} = h\hat{x}$. A partir das expressões anteriores, podemos obter a energia da configuração genérica (2.75). Após um cálculo longo, porém direto, obtemos a seguinte expressão:

Capítulo 2. Ferromagnetos Dipolares com Dimensões Finitas

$$\frac{E_{\text{total}}}{2M_0^2} = A\left(N, d, D\right) \sin^2 \theta - \left[B\left(N, d, D\right) + \frac{h}{M_0} C\left(N, \frac{\sigma}{d}\right)\right] \sin \theta , \qquad (2.79)$$

em que definimos o termo A(N, d, D):

$$\begin{split} A(N,d,D) &= 2\pi p \int_{0}^{\infty} \frac{e^{-u^{2}\left(\frac{\sigma}{d}\right)^{2}}}{u} \left(\frac{u}{p} + e^{-\frac{u}{p}} - 1\right) \times \\ &\left\{ \left(\frac{\sigma}{d}\right)^{2} \left[1 + \frac{\sin^{2} u/2}{\sin^{2} u/2N} - 2\cos\left(\frac{u(N-1)}{2N}\right) \frac{\sin\frac{u}{2}}{\sin\frac{u}{2N}} \right] \right. \\ &\left. + \frac{2}{\pi} \frac{\sin^{2} u/2}{u^{2}} - \left(\frac{\sigma}{d}\right) \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin u/2}{u} \left[\cot\left(\frac{u}{2N}\right) \tan\left(\frac{u}{2}\right) - 1 \right] du \right\} \\ &\left. - 4p \int_{0}^{\infty} e^{-u^{2}\left(\frac{\sigma}{d}\right)^{2}} \frac{e^{-u/2p}}{u^{3}} \sinh\left(\frac{u}{2p}\right) \tan^{2}\left(\frac{u}{2N}\right) \left[1 - (-1)^{N} \cos u \right] du \\ &\left. + \left(\frac{J}{g^{2} \mu_{B}^{2} / a^{3}}\right) \left[\frac{-2N + \pi(N-1) + 2}{8\sqrt{\pi}(d/a)(\sigma/a)} \right] - \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta K a^{3}}{g^{2} \mu_{B}^{2} / a^{3}}\right), \end{split}$$
(2.80)

o termo B(N, d, D):

$$B(N,d,D) = 2\pi p \int_0^\infty \frac{e^{-u^2 \left(\frac{\sigma}{d}\right)^2}}{u} \left(\frac{u}{p} + e^{-\frac{u}{p}} - 1\right) \times \left\{ \left(\frac{\sigma}{d}\right)^2 \left[1 + \frac{\sin^2 u/2}{\sin^2 u/2N} - 2\cos\left(\frac{u(N-1)}{2N}\right) \frac{\sin\frac{u}{2}}{\sin\frac{u}{2N}} \right] - \left(\frac{\sigma}{d}\right) \frac{1}{2\pi} \frac{\sin u/2}{u} \left[\cot\left(\frac{u}{2N}\right) \tan\left(\frac{u}{2}\right) - 1 \right] du \right\} + 2 \left(\frac{J}{g^2 \mu_B^2 / a^3}\right) \left[\frac{\pi(N-1)}{8\sqrt{\pi}(d/a)(\sigma/a)} \right],$$

$$(2.81)$$

além do termo $C\left(N, \frac{\sigma}{d}\right)$:

$$C\left(N,\frac{\sigma}{d}\right) = \frac{1}{2}\left[1 - \left(\frac{\sigma}{d}\right)\sqrt{2\pi}(N-1)\right].$$
(2.82)

Nas fórmulas acima, o parâmetro p = d/D denota a razão de aspecto do bloco. Na expressão da energia total (2.79), mantivemos apenas os termos que envolvem o ângulo θ , já que estamos interessados não em valores absolutos, mas em diferenças de energia entre estados distintos. A partir dela, podemos determinar a partir de qual largura do bloco d a estrutura magnética tipo II ($\theta = 0$) passa a ser mais estável que a estrutura tipo I ($\theta = \pi/2$). Porém, antes de aplicarmo-na ao caso específico do MnAs:GaAs, vamos investigar como esta fórmula é capaz de fornecer as formas das curvas de histerese ao se variar o campo externo h.

O método para obtenção das curvas de histerese que usaremos aqui foi desenvolvido por Stoner e Wohlfarth [12]. Trata-se de uma abordagem microscópica relativamente simples, sem parâmetros ajustáveis, e que leva em conta apenas a contribuição da rotação dos domínios, desprezando efeitos de desordem ou de *pinning*. Basicamente, ela consiste no seguinte: ao se aplicar um campo externo h > 0 suficientemente grande, é de se esperar que o mínimo global da energia livre (2.79) seja atingido para $\theta = \pi/2$, isto é, todos os spins alinhados com o campo na direção \hat{x} . Conforme a intensidade do campo diminui, outros mínimos podem surgir, e $\theta = \pi/2$ gradativamente deixa de ser um mínimo global para se tornar um mínimo local, correspondendo a um estado metaestável. Para um certo valor do campo, que pode ser negativo ou positivo, este ponto deixa de ser um mínimo local e a magnetização adquire uma nova configuração, correspondendo a outro ponto de mínimo $\theta \neq \pi/2$ da energia livre. Este processo de mudança de pontos de mínimo continua até que, para um campo suficientemente forte h < 0, o único mínimo do perfil de energia livre corresponde a $\theta = -\pi/2$, em que os spins se alinham paralelamente ao campo na direção $-\hat{x}$: tem-se, assim, o ramo superior da curva de histerese. O ramo inferior é obtido analogamente. Fica claro que o fenômeno de histerese é uma propriedade de não-equilíbrio do sistema, associado à presença de estados metaestáveis, os quais são característicos de transições de primeira ordem.

Vamos aplicar o método de Stoner-Wohlfarth ao caso do bloco finito cuja magnetização é dada por (2.75) e cuja energia livre, por (2.79). A minimização desta última fornece a equação trigonométrica:

$$\frac{\partial E}{\partial \theta} = 2A\sin\theta\cos\theta - \left(B + \frac{h}{M_0}C\right)\cos\theta = 0, \qquad (2.83)$$

com a condição:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \theta^2} = 2A\cos 2\theta + \left(B + \frac{h}{M_0}C\right)\sin\theta > 0.$$
(2.84)

A equação (2.83) possui duas possíveis soluções: a primeira refere-se aos casos em que a magnetização se alinha na mesma direção do campo externo $(\pm \hat{x})$:

$$\cos\theta = 0 \Rightarrow \theta_{\pm} = \pm \frac{\pi}{2}, \qquad (2.85)$$

os quais somente são pontos de mínimo se:

$$-2A + \left(B + \frac{h}{M_0}C\right) \ge 0, \qquad \text{para} \quad \theta = \frac{\pi}{2}$$
(2.86)

$$-2A - \left(B + \frac{h}{M_0}C\right) \ge 0, \qquad \text{para} \quad \theta = -\frac{\pi}{2}.$$
(2.87)

A segunda solução de (2.83) corresponde a uma configuração na qual a magnetização é descrita por:

$$\theta_0 = \arcsin\left(\frac{B + \frac{h}{M_0}C}{2A}\right), \qquad (2.88)$$

que é um mínimo apenas se:

$$2A \ge \frac{\left(B + \frac{h}{M_0}C\right)^2}{2A} \,. \tag{2.89}$$

Assim, para traçar o ramo superior da curva de histerese, tomamos um campo externo

h > 0 cuja intensidade seja grande o suficiente de modo que a condição (2.86) seja satisfeita e a magnetização aponte na direção positiva do eixo x. Diminuindo o valor de h, haverá um valor para o qual esta desigualdade não mais será verdadeira. Neste caso, há dois possíveis cenários: se $A \leq 0$, a condição para que θ_0 seja um mínimo, desigualdade (2.89), jamais poderá ser satisfeita e o sistema salta para a configuração na qual os spins apontam na direção negativa do eixo x, $\theta_- = -\pi/2$, já que a desigualdade (2.87) passa a ser verdadeira. Logo, a curva de histerese sofre um salto abrupto, adquirindo uma forma quadrada. A magnetização remanente M_r , definida como o valor de M_x quando h = 0, é dada por:

$$M_r = M_0 \,, \tag{2.90}$$

enquanto o valor do campo magnético h_c que anula M_x , denominado de campo coercivo, é:

$$h_c = -M_0 \left(\frac{B-2A}{C}\right) \,. \tag{2.91}$$

No caso em que A > 0, a situação se altera radicalmente, pois a condição (2.89) passa a ser satisfeita, de modo que outros estados estáveis surgem antes que a configuração correspondente a $\theta_{-} = -\pi/2$ seja alcançada. Assim, o sistema salta continuamente de um mínimo para o outro, até que *h* seja forte o suficiente para que a desigualdade (2.89) deixe de ser verdadeira e a magnetização passe a apontar na direção $-\hat{x}$. Nesta situação, a forma da curva de histerese corresponde a um degrau inclinado. A magnetização remanente fica sendo dada por:

$$M_r = \begin{cases} M_0 & , \text{ se } B > 2A \\ M_0 \left(\frac{B}{2A}\right) & , \text{ noutro caso }, \end{cases}$$
(2.92)

e o campo coercivo, por:

$$h_c = -M_0 \left(\frac{B}{2C}\right) \,. \tag{2.93}$$

Isto encerra a descrição do ramo superior da curva de histerese. Para se obter o ramo inferior, uma pequena modificação em (2.75) deve ser feita, pois esta configuração assume que os spins dentro das paredes de domínio apontam sempre na direção positiva do eixo x. Entretanto, após a magnetização ser reorientada pelo campo externo, deve-se obrigar os spins das paredes a apontarem na direção negativa. O fato de esse processo ter de ser realizado *a posteriori* e "à mão" é uma conseqüência da simplificação de termos considerado apenas domínios unidimensionais, já que a rotação apropriada de todos os spins envolveria a introdução de domínios em outras direções, originando configurações bem mais complexas que (2.75). De qualquer modo, após se realizar esta alteração, observamos que o ramo inferior é simétrico ao superior, como o esperado.

Podemos, agora, aplicar tudo o que foi apresentado nesta seção ao caso específico dos filmes finos de MnAs:GaAs. Como nosso objetivo é fazer uma conexão mais quantitativa com os resultados experimentais, estimamos, para os parâmetros microscópicos, valores ligeiramente diferentes em relação àqueles usados na seção 2.1, onde a comparação se deu em um nível mais qualitativo. Assim, tomando a = 4 Å e g = 4,5, obtemos que a magnetização de saturação assume o valor $M_0 = g\mu_B/a^3 = 0,65 \cdot 10^6$ A/m, que é bastante próximo do resultado experimental



Figura 2.25. Diferença de energia ΔE (em unidades de $2M_0^2$) entre a configuração com estruturas tipo I $(\theta = \pi/2)$ e a configuração com estruturas tipo II $(\theta = 0)$, em função da razão de aspecto p = d/D do bloco finito, na ausência de campos externos (h = 0).

 $0,67 \cdot 10^6 \text{ A/m}$ [63]. A exemplo do que foi estudado na seção 2.1, tomamos J = 4,5 meV e D = 130 nm, que é a espessura dos filmes finos crescidos em [13]. No que concerne a anisotropia cristalina, usamos os valores das constantes de anisotropia medidas em [64], a saber, $K_z = 7 \cdot 10^6 \text{ erg/cm}^3$ e $K_x = 7, 4 \cdot 10^6 \text{ erg/cm}^3$. Isto implica que o eixo x é o eixo de fácil magnetização, caracterizado por uma constante de anisotropia uniaxial efetiva $\Delta K = 0, 4 \cdot 10^6 \text{ erg/cm}^3$. Por fim, de acordo com o que discutimos a respeito das estruturas de domínio dos terraços ferromagnéticos nas seções anteriores, e tendo em vista os resultados experimentais de [13], tomamos N = 3 como o número de domínios referentes às estruturas magnéticas do tipo II.

Usando os resultados do Apêndice C, obtemos que a largura das paredes de domínio é dada por $\sigma \approx 4a = 16$ Å, que é muito menor que os valores típicos assumidos pela largura d dos terraços ferromagnéticos na região de coexistência, da ordem de centenas de nanômetros. De posse deste valor de σ , apresentamos, na figura 2.25, a diferença de energia livre (2.79), na ausência de campos externos, entre a configuração em que a magnetização aponta na direção \hat{x} (estruturas tipo I, $\theta = \pi/2$) e a configuração em que ela aponta na direção \hat{z} e está dividida em 3 domínios (estruturas tipo II, $\theta = 0$). Notamos que, conforme a largura do terraço diminui, a energia associada às estruturas tipo II se aproxima da energia associada às estruturas tipo I, de forma que uma reorientação magnética ocorre para $p = d/D \approx 1, 5$.

O efeito desta reorientação magnética nas curvas de histerese pode ser observado nos gráficos da figura 2.26, em que mostramos as curvas obtidas de acordo com a abordagem de Stoner-Wohlfarth delineada anteriormente, usando os parâmetros microscópicos do MnAs:GaAs. O termo *B* da energia livre, dado pela equação (2.81), permanece positivo para qualquer valor da razão de aspecto *p*, enquanto o termo *A*, dado por (2.80), é negativo para $p \gtrsim 1, 8$ e positivo para $p \lesssim 1, 8$. Assim, conforme discutido anteriormente, há uma mudança na forma da curva de histerese quando $p \approx 1, 8$: ela passa de um formato quadrado, quando os terraços são mais largos, para a forma de um degrau inclinado, quando os terraços se estreitam. Isto está intimamente relacionado à reorientação magnética, que ocorre quando *A* torna-se maior que *B*. A figura 2.27 apresenta o comportamento do campo coercivo e da magnetização remanente à medida em que a temperatura do filme é variada e a largura dos terraços, conseqüentemente, alterada.



Figura 2.26. Curvas de histerese preditas pelo modelo baseado na abordagem de Stoner-Wohlfarth. Nos gráficos, a magnetização relativa ao longo do eixo x, denotada por M/M_0 , é apresentada em função do campo externo $\vec{h} = h\hat{x}$ (em Oersted) para p = 1.9 (gráfico superior à esquerda), p = 1.7 (gráfico superior à direita) e p = 1.5 (gráfico inferior).

Observamos que M_r permanece igual a M_0 até um pouco após a mudança na forma das curvas de histerese, começando a diminuir para $p \leq 1,65$.

Podemos comparar a figura 2.26 com as curvas de histerese obtidas através de medidas de espalhamento ressonante de raios X [13] e apresentadas anteriormente na figura 2.6. As formas observadas experimentalmente assemelham-se bastante às formas derivadas a partir do presente modelo, com a diferença de que as primeiras são mais arredondas que estas últimas, provavelmente devido a efeitos de desordem na amostra [65]. Em [13], Coelho *et al.* encontram que a mudança na forma das histereses ocorre para $p_{exp} \approx 2,9$, e atribuem este efeito ao aparecimento das estruturas de domínio tipo II nas imagens de MFM. Apesar de o valor determinado experimentalmente não concordar exatamente com o valor obtido segundo o modelo de Stoner-Wohlfarth, $p \approx 1,8$, ambos estão satisfatoriamente próximos. Além disso, a abordagem fenomenológica desenvolvida aqui estabelece claramente a conexão entre os fenômenos observados via espalhamento de raios X - a mudança na forma da histerese - e aqueles observados via imagens de microscopia - a reorientação magnética.

Outros trabalhos experimentais sobre os filmes finos de MnAs:GaAs também indicaram a mudança na forma das curvas de histerese, como [66] e [52], nos quais a resposta magnética foi estudada usando-se SQUID ao invés de raios X. Mesmo em sistemas com uma geometria bastante diferente - discos, ao invés dos filmes finos extensos - uma mudança nas curvas de histerese qualitativamente similar a esta foi observada [67]. Em [66], os autores realizam simulações numéricas micromagnéticas, sugerindo que a mudança na forma das curvas de histerese deve-se à formação de domínios multidimensionais mais complexos, com paredes também ao longo da direção \hat{z} . Entretanto, o trabalho posterior de Däweritz *et al.* [52], no qual foram observadas



Figura 2.27. Campo coercivo h_c (em Oersted, gráfico à esquerda) e magnetização remanente relativa na direção $\hat{x} M/M_0$ (gráfico à direita) em função da razão de aspecto do bloco finito p.

as estruturas tipo II com 4 ou 5 domínios previstas pelo nosso modelo, indicou que ele oferece uma descrição muito mais satisfatória da estrutura magnética do MnAs:GaAs do que o modelo de domínios multidimensionais de [66].

É importante salientar que uma das principais discordâncias entre os resultados teóricos e as medidas experimentais reside no valor dos campos coercivos, que chegam a ter diferenças de uma ordem de grandeza. Contudo, este fato não deve ser encarado com muita preocupação, pois a incapacidade de modelos microscópicos de curvas de histerese reproduzirem corretamente o campo coercivo não é exclusividade da abordagem de Stoner-Wohlfarth, mas também ocorre em simulações micromagnéticas. A falta de um conhecimento mais preciso sobre os valores dos parâmetros microscópicos dos terraços e, principalmente, sobre a presença de desordem e centros de *pinning*, impede uma reprodução precisa das curvas de histerese experimentais.

É bastante interessante notar que uma abordagem tão simples como a de Stoner-Wohlfarth, que trata apenas da rotação coerente dos domínios magnéticos, forneça resultados com uma satisfatória concordância em relação às observações experimentais. Um refinamento do presente modelo que fosse capaz de aproximar o valor teórico p = 1, 8 do valor experimental $p_{exp} = 2, 9$, passaria por levar em conta a modulação ao longo da direção \hat{y} , a interação dipolar entre terraços distintos, a presença de desordem estrutural e os efeitos de nucleação, todos desprezados na atual modelagem. Nesse sentido, abordagens bastante distintas desta, como a equação dinâmica de Lifshitz-Gilbert [53], poderiam propiciar contribuições interessantes. De qualquer modo, os aspectos delineados nesta seção fornecem uma base bastante sólida para o entendimento das propriedades físicas relevantes à auto-organização magnética dos terraços ferromagnéticos de filmes finos de MnAs:GaAs.

Capítulo 3

Isolantes de Mott Dopados

Neste capítulo, investigamos a conexão entre as propriedades de transporte e a termodinâmica dos sistemas descritos pelo modelo de Brazovskii, explorado com detalhes nos capítulos anteriores. A principal motivação para tal estudo reside na observação, em compostos fortemente correlacionados, de mesofases eletrônicas inomogêneas características do modelo de Brazovskii, como as fases de listras e as fases nemáticas. Todos estes materiais são descritos como isolantes de Mott antiferromagnéticos dopados; dentre eles, destacam-se os cupratos (bidimensionais) e as manganitas (tridimensionais), aos quais estão associados fenômenos físicos tão interessantes quanto ainda misteriosos, como a supercondutividade de alta temperatura crítica e a magneto-resistência colossal, respectivamente. A partir de uma generalização de um modelo simples para a difusão eletrônica em sistemas inomogêneos, conhecido como rede de resistores aleatórios, desenvolvemos uma expansão perturbativa para a condutividade, com a qual investigamos como a termodinâmica do modelo de Brazovskii - e, em particular, o espectro das excitações elementares - influencia as propriedades de transporte. Além disso, estendemos esta análise para o caso de outros sistemas fortemente correlacionados e inomogêneos que não são descritos pela Hamiltoniana de Brazovskii: os isolantes de Mott puros. Neste contexto, mostramos como o entendimento sobre a conexão entre as propriedades críticas e as de transporte pode elucidar a classe de universalidade da transição de Mott a temperaturas finitas - uma transição de extrema importância no contexto de sistemas em que a interação eletrônica desempenha um papel fundamental.

3.1. Propriedades de transporte e as fases microscópicas dos isolantes de Mott: sais orgânicos, cupratos e niquelatos

Usualmente, ao se modelarem as propriedades físicas dos sólidos, a interação repulsiva Coulombiana entre os elétrons é desprezada, ou então, tratada apenas perturbativamente. Contudo, em alguns materiais existentes na Natureza, a correlação eletrônica é tão forte que não só não pode ser deixada de lado, como também se torna responsável pelas principais características apresentadas por eles: trata-se dos sistemas fortemente correlacionados. O ferromagnetismo, como o referente ao MnAs abordado no capítulo anterior, é um exemplo de manifestação desta forte correlação entre os elétrons, como também o é a supercondutividade [2]. Em geral, espera-se que as propriedades macroscópicas de transporte destes sistemas carreguem informações valiosas sobre a sua estrutura microscópica e a sua termodinâmica, já que, usualmente, os responsáveis pelo transporte são os elétrons, protagonistas da interação Coulombiana. Uma classe bastante importante de sistemas fortemente correlacionados, aos quais estão associados fenômenos físicos únicos e com elevado potencial para aplicações tecnológicas, são os isolantes de Mott [68]. Sua descrição microscópica apropriada será delineada na seção 3.2; por enquanto, vamos nos ater a alguns resultados experimentais gerais referentes a eles. De uma maneira simplificada, pode-se dizer que o caráter isolante desta classe de compostos é fruto da repulsão Coulombiana eletrônica, ao contrário dos isolantes tradicionais, em que o principal ingrediente responsável por essa propriedade é o Princípio da Exclusão de Pauli. Várias das fases interessantes relacionadas aos isolantes de Mott surgem quando lhes são introduzidos portadores de carga adicionais (elétrons ou buracos) - ou seja, quando eles são dopados.

Inicialmente, vamos nos ater aos isolantes de Mott puros, isto é, sem dopagem. Inúmeros materiais pertencem a esta classe, como o sesquióxido de Vanádio (V_2O_3) , o sulfeto de Níquel (NiS) e vários óxidos de metais de transição, tais quais os cupratos $(La_2CuO_4, YBa_2Cu_2O_6)$, os niquelatos (La_2NiO_4) , as cobaltitas $(LaCoO_3)$ e as manganitas $(LaMnO_3)$ [69]. Além destes, destacam-se também materiais orgânicos, como os sais da família BEDT – TTF. Alguns destes compostos são efetivamente tridimensionais (por exemplo, as manganitas e o sesquióxido de Vanádio), enquanto outros apresentam uma estrutura com arranjos de camadas bidimensionais (como os cupratos, os niquelatos e os sais orgânicos). Com o auxílio desses materiais, é possível investigar experimentalmente quando a fase isolante dá lugar a uma fase metálica. Uma das maneiras de se induzir esta transição - conhecida como transição de Mott - é através de variações na "intensidade relativa" da correlação eletrônica, o que pode ser feito alterando-se a temperatura do sistema ou a pressão a ele aplicada (hidrostática ou química).

O diagrama de fases típico dos isolantes de Mott é bem representado pela figura 3.1, obtida através de medidas experimentais realizadas sobre o V_2O_3 [70]¹. A altas temperaturas, observa-se sempre a existência de uma linha de primeira ordem separando as fases paramagnéticas isolante e metálica, terminando em um ponto crítico. A semelhança com a familiar transição líquido-gás não é meramente qualitativa, já que alguns trabalhos teóricos indicam que ambas devem pertencer à mesma classe de universalidade: a classe de Ising [71, 72]. A baixas temperaturas, simetrias associadas a outros graus de liberdade do sistema, como os graus de liberdade de spin e orbital, podem ser quebradas. Assim, outras fases não-triviais podem surgir, como a fase antiferromagnética, no caso do sesquióxido de Vanádio [73] e dos sais orgânicos [74], e a fase supercondutora não-convencional, no caso dos sais orgânicos (ambos os diagramas de fases estão apresentados na figura 3.1).

A fim de confirmar a classe de universalidade da transição de Mott térmica, experimentos realizados recentemente investigaram o comportamento da condutividade de isolantes de Mott perto do ponto crítico, extraindo os expoentes críticos β_{σ} , γ_{σ} e δ_{σ} , que já foram discutidos anteriormente na equação (1.15). Por clareza, repetimos aqui suas definições:

¹ A dopagem deste material, nesse caso, não tem como objetivo introduzir portadores de carga extras, mas sim aplicar uma pressão química ao composto.

3.1. Propriedades de transporte e as fases microscópicas dos isolantes de Mott: sais orgânicos, cupratos e niquelatos 83



Figura 3.1. Diagrama de fases experimentais dos isolantes de Mott $(V_{1-x}M_x)_2 O_3$ (gráfico à esquerda, adaptado de [70]; um outro similar é encontrado em [73]) e $\kappa - (BEDT - TTF)_2 X$ (gráfico à direita, adaptado de [74]) no plano (T, P), em que T denota a temperatura e P, a pressão. Os elementos M e os ânions X usados nos experimentos estão indicados nas figuras.

$$\begin{split} \Delta\Sigma\left(\tau,h=0\right) &\sim |\tau|^{\beta_{\sigma}} \\ \Delta\Sigma\left(\tau=0,h\right) &\sim |h|^{1/\delta_{\sigma}} \\ \frac{\partial\Sigma(\tau,h)}{\partial h}\bigg|_{h=0} &\sim |\tau|^{-\gamma_{\sigma}} \,. \end{split}$$
(3.1)

No contexto atual, $\Delta \Sigma = \Sigma - \Sigma_c$, $\tau \sim T - T_c$ e $h \sim P - P_c$, em que (T_c, P_c, Σ_c) correspondem aos valores assumidos, no ponto crítico, pela temperatura, pela pressão e pela condutividade, respectivamente. Em [73], Limelette *et al.* obtiveram estes expoentes para o composto $(V_x Cr_{1-x})_2 O_3$, que nada mais é que o sesquióxido de Vanádio com uma pressão química aplicada através da dopagem por Cromo. Para este material, de caráter tridimensional, os valores obtidos $\beta_{\sigma} \simeq 1/2, \gamma_{\sigma} \simeq 1$ e $\delta_{\sigma} \simeq 3$ concordam com os expoentes previstos pela teoria de campo médio do modelo de Ising, de acordo com o que está apresentado na tabela 3.1.

Posteriormente, em [74], Kagawa *et al.* obtiveram os expoentes críticos medindo a condutividade do sal orgânico $\kappa - (\text{BEDT} - \text{TTF})_2 X$, usando para isso o ânion $X = \text{Cu} [\text{N} (\text{CN})_2] \text{Cl}$, cujo diagrama de fases foi apresentado anteriormente na figura 3.1 (daqui por diante, este sal será denotado por $\kappa - \text{Cl}$). Efetivamente, este material orgânico possui caráter bidimensional, já que é composto por camadas condutoras planas de dímeros da molécula orgânica BEDT – TTF, separadas por camadas isolantes do ânion X, como mostra a figura 3.2. Os valores obtidos pelos pesquisadores foram $\beta_{\sigma} \simeq 1$, $\gamma_{\sigma} \simeq 1$ e $\delta_{\sigma} \simeq 2$, que discordam tanto dos expoentes de campo médio de Ising quanto dos valores característicos do modelo de Ising em duas dimensões (ver tabela 3.1).

Além disso, os expoentes acima satisfazem a relação de escala $\gamma_{\sigma} = \beta_{\sigma} (\delta_{\sigma} - 1)$, que pode ser deduzida a partir de (1.16), e não pertencem a nenhuma classe de universalidade previamente conhecida. Comparando os valores obtidos com os esperados para as classes de universalidade



Figura 3.2. Estrutura cristalina do sal orgânico $\kappa - (BEDT - TTF)_2 X$. À esquerda, é apresentada uma vista lateral, mostrando que as moléculas orgânicas (em branco) são empacotadas em planos separados por camadas isolantes do ânion X (em preto). À direita, é apresentada uma vista superior do plano condutor. Adaptada de [75].

expoente	Ising $2D$	Ising $3D$	Ising campo médio
α	0	0,1101	0
β	1/8	0,3263	1/2
γ	7/4	1,2372	1
δ	15	4,791	3
ν	1	0,6301	1/2
η	1/4	0,0364	0

Tabela 3.1. Expoentes críticos previstos para o modelo de Ising em 2D (solução de Onsager), 3D (compêndio de vários métodos numéricos) e campo médio (exato para 4 ou mais dimensões).

mais usuais (de Ising, do modelo XY e de Heisenberg), verifica-se inclusive que eles se encontram na direção contrária às correções introduzidas pelas flutuações aos expoentes de campo médio, como esquematizado na figura 3.3. Assim, a conclusão delineada pelos autores é que a transição de Mott em 2D pertenceria a uma classe de universalidade nova e não-convencional.

O formalismo que desenvolveremos durante este capítulo permitirá compreender mais claramente a relação entre as propriedades de transporte e a termodinâmica de sistemas inomogêneos, indo além da relação linear intuitiva que está implícita na equação (3.1), onde se assume tacitamente que os expoentes da condutividade são os mesmos expoentes do parâmetro de ordem. Posteriormente, na seção 3.4, revisitaremos o experimento referente ao κ – Cl e mostraremos como os resultados obtidos para os expoentes da condutividade podem ser explicados considerando a transição de Mott a temperaturas finitas pertencente à classe de universalidade de Ising. Vale mencionar que, no recente trabalho [76], os autores atribuem os expoentes críticos observados nos sais orgânicos às flutuações em torno de um ponto crítico quântico presente em T = 0. Contudo, como a transição de Mott se dá a uma temperatura finita distante desta região de flutuações quânticas, não consideramos esta explicação satisfatória.

O outro objetivo em se desenvolver uma teoria microscópica que leve em conta os efeitos das flutuações térmicas do parâmetro de ordem no comportamento da condutividade de um sistema inomogêneo consiste em investigar as principais características físicas do transporte eletrônico em fases descritas pelo modelo de Brazovskii. A motivação para tal estudo remete novamente aos isolantes de Mott, pois, quando dopados, eles podem apresentar fases eletrônicas de listras e nemáticas, que, por sua vez, podem ser descritas pela Hamiltoniana de Brazovskii, como dis-



Figura 3.3. Comparação entre os expoentes críticos β_{σ} , γ_{σ} e δ_{σ} , obtidos através de medidas da condutividade dos sais orgânicos, e os expoentes críticos referentes às classes de universalidade conhecidas modelo de Ising, XY, de Heisenberg e teoria de campo médio. Figura adaptada de [74].

cutiremos na seção 3.2. Estas fases são semelhantes às fases esméticas e nemáticas encontradas em cristais líquidos - objetos de investigação bastante comuns da Física da Matéria Condensada Mole [4]. Nos cristais líquidos, a anisotropia destas mesofases é refletida em propriedades macroscópicas óticas e hidrodinâmicas, como, por exemplo, a bi-refrigerência e a viscosidade. Logo, é interessante entender como as propriedades de transporte dos isolantes de Mott dopados são influenciadas pela morfologia das mesofases eletrônicas subjacentes.

Assim como mudanças na temperatura e na pressão induzem a transição metal-isolante de Mott, a inclusão de portadores de carga nos isolantes de Mott através do processo de dopagem também faz com que o sistema assuma outras fases. A que desperta a maior atenção da comunidade da Matéria Condensada Dura na atualidade é, provavelmente, a fase supercondutora de alta temperatura crítica que surge nos cupratos [77], cujo apelo reside no fato de ela não poder ser explicada pela teoria BCS da supercondutividade (daí a sua outra denominação de supercondutividade não-convencional) [78]. Nas imediações desta fase surgem ainda outros estados igualmente não-convencionais, como a fase de *pseudogap* e fase não-líquido de Fermi. Os cupratos são constituídos, em geral, por camadas planas fracamente acopladas de CuO₂, o que lhes confere um caráter bidimensional; um diagrama de fases bastante genérico desta classe de materiais está esquematizado na figura 3.4.

No artigo [16], Emery e Kivelson chamaram a atenção para a possibilidade de fases com listras ricas em buracos serem encontradas nos cupratos dopados, proposta feita pioneiramente por Zaanen e Gunnarson em [79]. A origem física desta fase, semelhante à esmética nos cristais líquidos, está associada a uma separação de fases frustrada pela interação Coulombiana, que remete ao modelo de Brazovskii, como discutiremos na seção 3.2. Desde então, muitas especulações foram feitas sobre possíveis mecanismos geradores da supercondutividade não-convencional relacionados às fases de listras (para uma breve revisão geral sobre o assunto, ver [20]). Contudo, nosso interesse não é na investigação da supercondutividade de alta temperatura crítica, mas sim na possível descrição das fases de listras eletrônicas pelo modelo de Brazovskii. Vale salientar



Figura 3.4. Diagrama de fases genérico dos cupratos dopados com uma concentração de buracos n e submetidos a uma temperatura T. AF denota a fase isolante de Mott antiferromagnética, SC, a fase supercondutora não-convencional, PG, a fase de *pseudogap* e NLF, a fase metálica não-líquido de Fermi. As linhas cheias representam transições de fase, enquanto as linhas tracejadas indicam *crossover*.

que outra família de compostos com estrutura bastante semelhante aos cupratos, os niquelatos, também apresentam fases de listras. A grande diferença entre estas duas classes de materiais reside no fato de esta última não só não apresentar supercondutividade não-convencional, como também permanecer isolante para qualquer grau de dopagem [80].

A observação experimental da fase de listras de carga, tanto nos cupratos quanto nos niquelatos, não vem sendo uma tarefa trivial até o presente momento. Em geral, usam-se meios indiretos para se indicar sua presença, como, por exemplo, a procura por fases de listras de spin através de medidas de espalhamento de nêutrons [81]. Modelos teóricos prevêem que a existência de listras de spin implicam necessariamente na existência de listras de carga, apesar de a recíproca não ser verdadeira [81]. Nesse sentido, no que concerne os cupratos, há fortes evidências indiretas da existência de listras eletrônicas para certas concentrações de dopagem nos compostos LSCO (La_{2-x}Sr_xCuO₄), LCO (La₂CuO_{4+ δ}) e YBCO (YBa₂Cu₂O_{6+y}). Observações diretas, através da análise dos picos de Bragg resultantes do espalhamento de nêutrons, foram obtidas para as classes Nd-LSCO (La_{1.6-x}Nd_{0.4}Sr_xCuO₄) e LBCO (La_{1.875}Ba_{0.125-x}Sr_xCuO₄) (para mais detalhes, ver as referências do capítulo 13 de [81]). Nos niquelatos, evidências experimentais envolvendo não só dados de espalhamento de nêutrons, como também de NMR, de μ SR e de difração de raios X, apontam para a presença de listras de carga nos compostos LSNO (La_{2-x}Sr_xNiO₄) e LNO (La₂NiO_{4+ δ}) [80].

Assim, dadas estas complicações práticas, o que muitos experimentos investigam é a assinatura das listras de carga nas propriedades de transporte dos compostos - em particular, procurando anisotropias ou efeitos não-lineares na resistividade. No que se refere aos niquelatos, tanto experimentos um pouco mais antigos [82] como outros mais recentes [83, 84] mostram saltos súbitos na resistividade. Na figura 3.5, apresentamos algumas das curvas experimentais obtidas nestes trabalhos. Há dois aspectos distintos a serem salientados: em [82, 83], o salto, explicitado no gráfico da derivada do logaritmo da resistividade, ocorre concomitantemente ao surgimento

3.1. Propriedades de transporte e as fases microscópicas dos isolantes de Mott: sais orgânicos, cupratos e niquelatos 87



Figura 3.5. Medidas de resistividade nos niquelatos. O gráfico à esquerda superior refere-se ao composto $La_{2-x}Sr_xNiO_4$, e mostra o salto da resistividade devido ao surgimento da fase de listras apresentando a derivada do logaritmo da resistividade em função da temperatura (adaptado de [82]). O gráfico à direita superior mostra novamente um salto da resistividade na temperatura de ordenamento de carga T_{CO} , mas referente ao composto $Nd_{2-x}Sr_xNiO_4$ (adaptado de [83]). O gráfico inferior indica a existência de vários saltos pequenos da resistividade para temperaturas abaixo de T_{CO} , quando o composto $La_2NiO_{4+\delta}$ é resfriado vagarosamente (adaptado de [84]).

da fase de listras. Já em [84], vários saltos menores são observados quando o sistema é resfriado vagarosamente, para temperaturas abaixo da de ordenamento da fase de listras.

Enquanto nos niquelatos as medidas de transporte apontam para a existência de listras estáticas e fortemente acopladas com a rede cristalina, nos cupratos elas indicam que as listras de carga são mais dinâmicas e flutuantes, sugerindo, na verdade, a ocorrência de uma fase nemática, em que apenas a ordem orientacional das listras seria preservada. Em [85], onde os compostos LSCO e YBCO são estudados, os autores encontram uma anisotropia nas resistividades medidas paralela e perpendicularmente às listras. Como tal anisotropia não pode ser atribuída apenas à ortorrombicidade da rede, ela indica a presença efetiva de distribuições unidimensionais de carga - algumas das curvas experimentais são apresentadas na figura 3.6. Além disso, os pesquisadores sugerem que o valor relativamente baixo desta anisotropia indicaria a presença de uma ordem nemática, e não esmética. Experimentos posteriores sobre ruídos e efeitos não-lineares nas medidas de resistividade dos cupratos [86, 87], além de trabalhos teóricos acerca deste tema [28, 17], corroboram a versão de que o ordenamento das listras é do tipo nemático. Mais recentemente, um outro grupo experimental encontrou indícios diretos de nematicidade nos



Figura 3.6. Medidas de resistividade nos cupratos, adaptadas de [85]. O gráfico à esquerda refere-se aos compostos LSCO e mostra que a resistividade ao longo da direção perpendicular às listras de carga ρ_b é maior que a resistividade paralela às listras ρ_a , para temperaturas abaixo da de ordenamento. O gráfico à direita é referente aos compostos YBCO, onde ρ_b , agora, denota a resistividade medida paralelamente às listras, enquanto ρ_a , a resistividade medida na direção ortogonal.

compostos YBCO através da análise de dados de espalhamento de nêutrons [88]. Vale mencionar ainda que fases eletrônicas nemáticas foram encontrados em outros sistemas, como o gás de elétrons bidimensional submetido a campos magnéticos moderados, ao qual está associado o efeito Hall quântico [89, 90].

No decorrer do capítulo, desenvolveremos um modelo microscópico capaz de fazer a ponte entre uma propriedade macroscópica do sistema - a condutividade - e a morfologia da fase mesoscópica eletrônica que o caracteriza - especificamente, se ela possui ordenamento esmético ou nemático. Assim, procuraremos assinaturas exclusivas da Hamiltoniana de Brazovskii no comportamento da resistividade, de modo a estabelecer critérios que sejam capazes de decidir sobre a validade deste modelo na descrição das fases inomogêneas observadas nos cupratos e nos niquelatos.

3.2. Descrição microscópica de isolantes de Mott dopados e não-dopados

Conforme explicado anteriormente, o caráter não condutor dos isolantes de Mott deve-se à presença de uma forte repulsão Coulombiana entre os elétrons. O modelo mais simples usado na literatura para descrevê-los microscopicamente é o chamado modelo de Hubbard [69]:

$$H_{\text{Hubbard}} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \left(a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma} \right) + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} , \qquad (3.2)$$

no qual $a_{i\sigma}^{\dagger}$ é o operador de segunda quantização de criação de um elétron com spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ no sítio *i* de uma rede cristalina, e $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^{\dagger}a_{i\sigma}$ é o número de ocupação do sítio *i*. O primeiro termo de (3.2), chamado de termo de *hopping*, refere-se ao ganho de energia dos elétrons quando eles se delocalizam pela rede, saltando de um sítio para o outro. Tal ganho de energia tem origem no Princípio de Heisenberg, já que, quanto mais delocalizado for o elétron, maior será a incerteza na sua posição Δx , implicando em uma menor incerteza na sua velocidade Δv , o que

3.2. Descrição microscópica de isolantes de Mott dopados e não-dopados

resulta na minimização da sua energia cinética. Considerando um modelo *tight-binding*, em que as funções de onda dos elétrons $\varphi_{i\sigma}(\vec{x})$ são descritas por orbitais atômicos de Wannier, podemos escrever o termo de *hopping t* como a superposição de duas funções de onda:

$$t_{ij} = \int d^d x \varphi_{i\sigma}^*\left(\vec{x}\right) \frac{1}{2m} \nabla^2 \varphi_{j\sigma}\left(\vec{x}\right) , \qquad (3.3)$$

em que m é a massa do elétron. Na Hamiltoniana (3.2), fizemos a aproximação usual de se tomar apenas o *hopping* entre primeiros vizinhos. Ao contrário do primeiro termo da Hamiltoniana de Hubbard, que envolve sítios distintos, o segundo termo é puramente local. U é denominada de energia de Hubbard, e refere-se ao custo energético de dois elétrons com spins opostos ocuparem o mesmo sítio devido à repulsão Coulombiana. O caráter de longo alcance da interação Coulombiana é desprezada neste modelo, uma aproximação que é justificada pelos efeitos de blindagem dos outros elétrons e pela forte localização das funções de onda na descrição *tight-binding*. Desse modo, o termo U é dado por:

$$U = \int d^d x d^d x' \varphi_{i\sigma}^*\left(\vec{x}\right) \varphi_{i\sigma}\left(\vec{x}\right) \frac{e^2}{\left|\vec{x} - \vec{x'}\right|} \varphi_{i-\sigma}^*\left(\vec{x'}\right) \varphi_{i-\sigma}\left(\vec{x'}\right) , \qquad (3.4)$$

em que e é a carga do elétron. Fica evidente que uma outra aproximação assumida nesta abordagem é que os elétrons estão restritos a circularem apenas por uma banda do sólido. Apesar de simples e repleto de aproximações, o modelo de Hubbard captura os principais ingredientes físicos presentes nos isolantes de Mott: a competição entre um termo delocalizante, que facilita a condução (o termo de *hopping t*), e um outro termo que tende a localizar os elétrons, impedindo sua livre circulação pela banda (o termo U).

Antes de prosseguir, é importante questionar a validade das aproximações feitas em (3.2) no contexto dos materiais de nosso interesse. Vamos nos ater ao caso dos óxidos de metais de transição: nestes compostos, o nível atômico de valência (e, conseqüentemente, a banda de valência correspondente no sólido) é o 3d, que tem degenerescência 10, já que seu momento angular orbital é l = 2. Para cristais com simetria cúbica, a anisotropia cristalina quebra parcialmente esta degenerescência, criando dois sub-níveis: o t_{2g} , de menor energia e com degenerescência 6, e o e_g , mais energético e com 4 estados degenerados. Logo, para que possamos considerar que as excitações de mais baixa energia permanecem em uma única banda perto do nível de Fermi, devemos assumir quebras de simetria adicionais. No caso dos cupratos e dos niquelatos, a estrutura cristalina tipo perovskita separa alguns destes estados degenerados, por possuir menor simetria que a rede cúbica. Além disso, pode-se esperar que distorções devido ao efeito Jahn-Teller também contribuam para este processo.

Contudo, há que se considerar ainda o papel do orbital p do átomo de oxigênio intercalado entre dois átomos do metal de transição na estrutura cristalina destes compostos. A aproximação de uma única banda assume, implicitamente, ou que o orbital ligante p está relativamente distante do orbital relevante d, ou que eles sofrem uma forte hibridização, tornando-se, efetivamente, um único orbital. Por fim, vale mencionar que o orbital d, apesar de ter um caráter localizado em relação ao íon que compõe a rede cristalina, apresenta uma certa superposição com os orbitais dos seus vizinhos. Tal fato pode prejudicar - ou até mesmo invalidar, em alguns casos - a aproximação de se incluir apenas o termo local da repulsão Coulombiana em (3.2).



Figura 3.7. Densidade de estados $\rho(E)$ do modelo de Hubbard para os casos de fraca correlação $U \ll t$, em que existe uma única banda semi-preenchida (à esquerda), e forte correlação $U \gg t$, em que é aberto um gap entre duas sub-bandas (à direita).

Tendo feito estas ressalvas, voltemos agora ao modelo de Hubbard (3.2) para investigar suas propriedades. Uma outra relevante quantidade de controle termodinâmico, além da razão U/t e da temperatura T, é o número de ocupação eletrônica médio $n = \langle n_{i\sigma} \rangle$, que, para um composto não-dopado, assume o valor n = 1. Fica claro que, no caso dos cupratos e dos niquelatos, como a estrutura eletrônica dos metais de transição é $3d^9$, há apenas um portador por célula unitária, de modo que n = 1. Já nos sais orgânicos, cada dímero de moléculas orgânicas da camada condutora fornece um elétron para um ânion da camada isolante, implicando novamente em uma semi-ocupação da banda. Assim, a estrutura cristalina relevante nos sais orgânicos é aquela formada pelos centros dos dímeros, que no caso da família $\kappa - ET$ é triangular.

Vamos nos concentrar inicialmente no caso de n = 1. Caso a interação eletrônica fosse desprezível, isto é, $U \ll t$, a Hamiltoniana de Hubbard (3.2) poderia ser facilmente diagonalizada no espaço de momentos. Para um rede hiper-cúbica com parâmetro de rede a, teríamos:

$$H'_{\text{Hubbard}} = \sum_{\vec{k},\sigma} \varepsilon_0\left(\vec{k}\right) a^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma}, \quad \text{com} \quad \varepsilon_0\left(\vec{k}\right) = -2t \sum_{\mu=x,y,\dots} \cos\left(ak_{\mu}\right) \,. \tag{3.5}$$

Na linguagem usual de Física da Matéria Condensada Dura, a equação acima equivale a uma banda de largura 2t, gerada pela periodicidade da rede. Como ela está semi-preenchida, o sistema seria condutor, de acordo com a teoria tradicional de condução em sólidos, que leva em conta apenas o Princípio da Exclusão de Pauli [2].

Entretanto, nos isolante de Mott, não só a correlação eletrônica não pode ser desprezada como ela é, geralmente, muito maior que o termo de *hopping*, $U \gg t$. Assim, os elétrons teriam a tendência de permanecer fixos, sem saltar para os sítios vizinhos. Usando a linguagem de bandas, diz-se que a correlação eletrônica abre um *gap* na banda descrita por (3.5), gerando duas sub-bandas de Hubbard, de modo que uma fica completamente ocupada, e a outra, vazia: tem-se, assim, um isolante de Mott. A figura 3.7 esquematiza estas duas configurações opostas, a metálica ($U \ll t$) e a isolante ($U \gg t$), no espaço de momentos.

A razão U/t pode ser controlada experimentalmente através da pressão química ou hidrostática aplicada sobre o material, pois os átomos ou moléculas da rede cristalina tendem a reajustar a



Figura 3.8. Densidade de estados $\rho(E)$ de um sistema descrito pela Hamiltoniana de Hubbard obtida através da teoria de campo médio dinâmica (DMFT), a T = 0, para vários valores da razão U/t. De cima para baixo, tem-se a seqüência U/2t = 1; 2; 2, 5; 3. A transição metal-isolante é claramente observada pela abertura de um gap. Adaptada de [91].

distância típica entre os sítios de acordo com a nova pressão exercida sobre o composto. Apesar de isto não alterar o termo local U, o termo de *hopping t* sofre variações, já que a superposição entre as funções de onda de sítios vizinhos é modificada. Portanto, a princípio, é possível induzir uma transição metal-isolante de Mott a T = 0 apenas mudando-se a pressão externa: trata-se de uma transição de fase quântica, em que o caráter do elétron muda de ondulatório (metal) para corpuscular (isolante). A figura 3.8 mostra o comportamento da densidade de estados de uma configuração inicialmente metálica quando se varia a razão U/t; ela é obtida através da solução de campo médio dinâmica (DMFT, do inglês dynamical mean field theory) do modelo de Hubbard, que seria exata para o caso de infinitas dimensões (ou, mais precisamente, para o caso em que o número de coordenação da rede tende a infinito) [91].

É importante mencionar que a fase isolante de Mott, a baixas temperaturas, pode estar associada a estados que quebram simetrias relacionadas a outros graus de liberdade do sistema, como orbitais ou de spin. Por exemplo, para $U \gg t$, o hopping virtual entre os elétrons vizinhos gera, em segunda ordem em teoria de perturbação, um acoplamento antiferromagnético tipo Heinseberg entre os spins, com parâmetro de troca $J = 4t^2/U$. Contudo, conforme a temperatura do sistema é aumentada, a temperatura de Néel é atingida e o sistema de Hubbard deixa de ter ordem antiferromagnética, passando a se comportar como um paramagneto.

Além da razão U/t, a temperatura é outra quantidade que também pode induzir a transição metal-isolante, devido às diferentes entropias de cada fase: tem-se, assim, uma transição térmica. A figura 3.9 ilustra o diagrama de fases típico de um isolante de Mott no plano (P, T), em acordo com os resultados experimentais apresentados na seção 3.1. A inclinação da linha de primeira ordem que separa as fases metálica e isolante é explicada pelo fato de a entropia associada a esta



Figura 3.9. Diagrama de fases típico de um isolante de Mott semi-preenchido (n = 1) no plano (P, T), em que P denota a pressão e T, a temperatura. As fases paramagnéticas isolante (PI) e metálica (PM) são separadas por uma linha de transição de primeira ordem (curva pontilhada) que termina em um ponto crítico. A região crítica a ele associada está representada pela área sombreada. AFI refere-se à fase isolante antiferromagnética, que ocorre a baixas temperaturas.

última ser maior que a associada à primeira: enquanto a entropia por elétron na fase metálica pode ser estimada por $k_B T/T_F$, em que T_F é a temperatura de Fermi, a entropia por elétron na fase isolante pode ser estimada por $k_B \ln 2$, dado o caráter localizado dos elétrons. Como, em geral, $\ln 2 \gg T/T_F$, é de se esperar que, para alguma temperatura finita, ocorra a transição de fase [3].

A natureza do ponto crítico no qual a linha de coexistência de fases termina foi investigada teoricamente por vários trabalhos, dentre os quais se destacam [71] e [72]. Em [71], Castellani *et al.* desenvolvem um processo de decimação da Hamiltoniana de Hubbard (3.2) para construir uma Hamiltoniana de Ginzburg-Landau efetiva, na qual os graus de liberdade de spin e de carga aparecem explicitamente. De acordo com esta abordagem, o ponto crítico térmico pertence à classe de universalidade de Ising, e o parâmetro de ordem escalar da transição de Mott está associado à densidade de sítios com dupla ocupação. Nesta interpretação, as fases paramagnéticas isolante e metálica são encaradas, respectivamente, como um gás e um líquido de sítios duplamente ocupados.

Estes resultados foram confirmados por Kotliar *et al.* em [72], onde os autores abordam o problema usando as técnicas da teoria de campo médio dinâmica (DMFT), exata para o caso de uma rede com número de coordenação infinito. Através da DMFT, os pesquisadores obtêm um parâmetro de ordem microscópico apropriado para o problema, mostrando que o funcional efetivo que o descreve corresponde, de fato, a uma Hamiltoniana do tipo Ising. A reconciliação entre estes resultados bem estabelecidos e as medidas de condutividade realizadas por Limelette *et al.* nos óxidos de Vanádio [73] e Kagawa *et al.* nos sais orgânicos [74] será elucidada na seção 3.4, após o desenvolvimento de um formalismo que relacione as propriedades de transporte com a termodinâmica de sistemas inomogêneos na seção 3.3.

Tudo o que foi discutido até agora nesta seção refere-se ao modelo de Hubbard (3.2) na rede semi-preenchida. Alterações no número de ocupação n - que, experimentalmente, podem ser feitas dopando-se o composto original com buracos ou elétrons - podem também induzir transições de fase. Nos cupratos, conforme explicado anteriormente, o aumento no número de portadores positivos ocasiona o aparecimento da fase supercondutora não-convencional. A
3.2. Descrição microscópica de isolantes de Mott dopados e não-dopados

descrição do modelo de Hubbard com $n \neq 1$, contudo, não é uma tarefa trivial; no caso de um isolante de Mott antiferromagnético dopado, em que $U \gg t$, as excitações de mais baixa energia referentes aos graus de liberdade de spin e de carga são descritas pela Hamiltoniana conhecida como t - J. Ela é obtida a partir de uma expansão perturbativa da Hamiltoniana original (3.2) em potências de t/U [92]:

$$H_{t-J} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \left(a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma} \right) + J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{n_i n_j}{4} \right) , \qquad (3.6)$$

em que $J = 4t^2/U$ é o parâmetro de troca e $\vec{S}_i = \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} a_{i\sigma}^{\dagger} \vec{\sigma}_{\sigma,\sigma'} a_{i\sigma'}$ é o spin do elétron no sítio *i*, com $\vec{\sigma}$ representando as matrizes de Pauli. A Hamiltoniana (3.6) possui ainda um vínculo adicional que proíbe sítios duplamente ocupados, ou seja:

$$n_i = \sum_{\sigma} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma} = 0, 1.$$
(3.7)

O modelo t-J vem sendo largamente investigado por uma variedade de técnicas até os dias de hoje. Não é nosso objetivo enveredar por esta área, mas sim entender como os isolantes de Mott dopados por buracos podem formar fases de listras de cargas, de acordo com os resultados experimentais apresentados na seção 3.1. O primeiro aspecto do modelo t-J necessário para esse entendimento consiste na sua tendência, para algumas regiões do espaço de parâmetros (n, J/t), em separar o sistema em duas fases distintas: uma fase antiferromagnética e uma fase rica em buracos. Inúmeros trabalhos sobre a Hamiltoniana (3.6) apontam nesta direção (ver referências citadas no capítulo 12 de [81]); contudo, vamos nos ater aqui a uma discussão meramente qualitativa, porém bastante esclarecedora.

Consideremos, inicialmente, a fase isolante de Mott sem nenhum buraco presente, em que as cargas estão localizadas devido à forte repulsão Coulombiana $U \gg t$. A energia do sistema é minimizada pelo alinhamento antiferromagnético entre os spins dessas cargas, de acordo com a interação de troca caracterizada por $J = 4t^2/U$. Ao se introduzirem os buracos, eles tendem a se delocalizar pela rede, saltando de um sítio para o outro, de modo a minimizar a energia cinética. Tomemos um único buraco saltando pela rede composta pelos spins anti-alinhados: quando ele se move para o vizinho mais próximo, um dos spins também se move, mas para um sítio da sub-rede "errada". Assim, a circulação do buraco através da rede deixa, no seu rastro, uma série de ligações antiferromagnéticas frustradas, como ilustra a figura 3.10. Portanto, a partir deste exemplo simples, fica claro que a minimização da energia de troca dos spins não pode ocorrer concomitantemente à minimização da energia cinética dos buracos. Tem-se, em conseqüência, um sistema altamente frustrado, cuja tendência é se separar em duas fases distintas: de um lado, a fase antiferromagnética, composta pelos spins localizados, e de outro, a fase rica em buracos. Este processo é bastante análogo à separação de fases que ocorre quando são misturados dois fluidos imiscíveis.

Contudo, há um ingrediente faltando no modelo t - J (3.6) que frustra essa separação de fases: o caráter de longo alcance da repulsão Coulombiana entre os buracos. É evidente que uma fase só com buracos estaria associada a um custo energético eletrostático muito elevado, que acaba por impedir que as fases se separem completamente. Uma modelagem simples proposta



Figura 3.10. Esquema da frustração gerada pela introdução de um buraco em um isolante de Mott antiferromagnético. Ao saltar pelos sítios, de modo a minimizar sua energia cinética, o buraco deixa uma seqüência de ligações antiferromagnéticas frustradas, que impedem a minimização da energia de troca dos spins. Adaptada de [81].

por Emery e Kivelson [16] para se levar em conta estas duas tendências competitivas consiste em tomar as Hamiltonianas efetivas:

$$\mathcal{H}_{1}[\phi] = \int d^{d}x \left[\frac{\tau_{0}}{2} \phi^{2}(\vec{x}) + \left| \vec{\nabla} \phi(\vec{x}) \right|^{2} + \frac{u}{4} \phi^{4}(\vec{x}) \right] \mathcal{H}_{2}[\phi] = Q \int d^{d}x d^{d}x' \frac{\phi(\vec{x}) \phi(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|}, \qquad (3.8)$$

em que u, $Q \in \tau_0 \propto T - T_c$ são os parâmetros efetivos, com T_c referindo-se à temperatura de separação de fases na ausência de frustração e Q, à magnitude relativa da interação Coulombiana. O parâmetro de ordem $\phi(\vec{x})$ denota a flutuação da densidade de carga local em relação à densidade média, de modo que $\phi(\vec{x}) > 0$ representa uma região rica em buracos, enquanto $\phi(\vec{x}) < 0$, uma região pobre em buracos. Assim, o termo \mathcal{H}_1 descreve a forte tendência que o sistema tem em separar as duas fases $\phi > 0 \in \phi < 0$, enquanto o termo \mathcal{H}_2 representa a repulsão Coulombiana de longo alcance entre cargas de mesmo sinal².

Ora, as Hamiltonianas (3.8) são exatamente as mesmas apresentadas nas fórmulas (1.3) e (1.4) e discutidas anteriormente na seção 1.1. Portanto, as excitações de carga de mais baixa energia do sistema podem ser descritas pela Hamiltoniana de Brazovskii:

$$\mathcal{H}[\phi] = \int d^d x \left[\frac{\tau_0}{2} \phi^2\left(\vec{x}\right) + \phi\left(\vec{x}\right) \frac{\left(\nabla^2 + q_0^2\right)^2}{8q_0^2} \phi\left(\vec{x}\right) + \frac{u}{4} \phi^4\left(\vec{x}\right) \right],$$
(3.9)

com $q_0 \propto Q^{1/4}$. Conforme amplamente explicado nos capítulos precedentes, o modelo de Brazovskii em duas dimensões prevê a existência da fase de listras para temperaturas abaixo da espinodal, em acordo qualitativo com as evidências experimentais referentes aos cupratos e aos niquelatos apresentadas na seção 3.1. Portanto, fecha-se a conexão entre o modelo de Brazovskii e as fases eletrônicas inomogêneas dos isolantes de Mott antiferromagnéticos dopados.

² Obviamente, para este modelo contemplar a separação de fases, o parâmetro de ordem deve ser conservado, de modo que $\int d^d x \phi(\vec{x}) = 0$, refletindo a neutralidade elétrica do sistema.

3.3. Redes de resistores correlacionados e expansão perturbativa da condutividade

Nosso objetivo é desenvolver uma teoria para a difusão eletrônica em sistemas descritos pelo modelo de Brazovskii, na qual seja possível identificar assinaturas específicas da Hamiltoniana (3.9) - como, por exemplo, o espectro das flutuações de mais baixa energia, descrito pela função de correlação (1.38). Alcançado este fim, teríamos critérios adicionais para decidir sobre a aplicabilidade do modelo de Brazovskii na descrição das fases de listras em isolantes de Mott dopados, como no caso dos cupratos e dos niquelatos. Além disso, usaremos este formalismo, que conecta propriedades termodinâmicas com propriedades de transporte, para revisitar os recentes resultados experimentais sobre a classe de universalidade da transição térmica de Mott a partir de medidas de condutividade em óxidos de Vanádio e sais orgânicos [73, 74].

Há uma miríade de métodos disponíveis na literatura para a descrição das propriedades de transporte de sistema inomogêneos, compreendendo desde cálculos explícitos da constante dielétrica de misturas bifásicas [93] até abordagens mais sofisticadas envolvendo técnicas de topografia estatística [94]. Para os nossos objetivos, acreditamos ser mais apropriado o uso de um modelo inspirado na teoria da percolação, conhecido como rede de resistores aleatórios (RRN, do inglês *random resistor network*) [95].

De uma maneira geral, a RRN consiste em uma rede na qual dois tipos de resistores, com condutividades microscópicas $\sigma_1 \in \sigma_2$, estão distribuídos pelas ligações entre os sítios de maneira aleatória, com probabilidades dadas por $p \in 1-p$, respectivamente. No caso em que uma dessas condutividades é nula ou infinita, há uma estreita relação entre as propriedades geométricas percolativas do sistema e suas propriedades de transporte, de modo que os expoentes críticos da condutividade podem ser relacionados com os expoentes críticos da transição percolativa subjacente (para mais detalhes, ver o Apêndice D). Esta versão clássica da RRN tem sido usada para explicar as características do transporte eletrônico em uma vasta gama de sistemas inomogêneos, como filmes de compósitos [96], manganitas [97] e calcogênios de prata [98].

Apesar de as inúmeras investigações sobre a RRN, principalmente na situação em que uma das condutividades se anula, terem resultado em uma teoria relativamente bem estabelecida (ver, por exemplo, [99, 100]), há poucos trabalhos sobre o importante caso em que os resistores não estão aleatoriamente distribuídos pela rede, mas possuem algum grau de correlação espacial, formando uma rede de resistores correlacionados. Dentre tais trabalhos, destacam-se a investigação seminal de [101] e várias simulações numéricas recentes referentes a sistemas de consagrado interesse, como as manganitas [102] e as fases nemáticas nos cupratos [17]. É evidente que o nosso caso de interesse, em que as listras de carga estão correlacionadas segundo a Hamiltoniana de Brazovskii, não pode simplesmente ser aproximado por uma RRN em que as listras ricas em buracos ($\phi > 0$) possuam uma condutividade média σ_1 maior que a condutividade σ_2 das listras pobres em buracos ($\phi < 0$). Logo, faz-se necessário o desenvolvimento de uma teoria microscópica para as redes de resistores correlacionados.

Além de levar em conta a correlação entre as listras, esta teoria deve contemplar o caso em que nenhuma das duas condutividades é nula, já que, a temperaturas finitas, mesmo a fase isolante será capaz de conduzir carga. Assim, as propriedades percolativas da rede devem ficar em segundo plano frente às propriedades termodinâmicas do parâmetro de ordem que descreve as fases inomogêneas. Um primeiro passo para se construir tal formalismo poderia ser a partir do trabalho de Blackman [103], que desenvolve uma fórmula perturbativa para a condutividade global de uma RRN bidimensional quadrada, caracterizada por duas condutividades microscópicas com valores próximos. O contraste entre tais condutividades, denotado por $\Delta_{ij} = (\sigma_{ij} - \sigma_0) / \sigma_0$, é o parâmetro perturbativo do sistema, com σ_{ij} referindo-se à condutividade entre os sítios (i, j)e σ_0 , à condutividade média da rede. A partir de uma abordagem de meios efetivos, o autor chega à seguinte expansão para a condutividade Σ_{α} de uma ligação $\alpha = (i, j)$ entre os sítios i e j da rede:

$$\frac{\Sigma_{\alpha}}{\sigma_0} = 1 + \Delta_{\alpha} + \Gamma_{\alpha\beta}\Delta_{\alpha}\Delta_{\beta} + \Gamma_{\alpha\beta}\Gamma_{\beta\delta}\Delta_{\alpha}\Delta_{\beta}\Delta_{\delta} + \mathcal{O}\left(\Delta^4\right) \,, \tag{3.10}$$

em que há uma soma implícita sobre as variáveis $(\beta, \delta, ...)$, referentes a ligações paralelas a α . As funções $\Gamma_{\alpha\beta}$ decaem rapidamente com a distância em relação à ligação $\alpha = (i, j)$; denominando os sítios correspondentes à ligação β de (k, l), tem-se a seguinte fórmula para $\Gamma_{\alpha\beta}$:

$$\Gamma_{\alpha\beta} = C_{il} + C_{jk} - C_{ik} - C_{jl} , \qquad (3.11)$$

com:

$$C_{ij} = \frac{1}{2} \int_0^\infty dt e^{-2t} \left(I_0 I_0 - I_m I_n \right) , \qquad (3.12)$$

em que I denota a função de Bessel modificada, enquanto os inteiros (m, n) referem-se ao número de sítios que separa i de j nas direções vertical e horizontal, respectivamente. Apesar de (3.10) poder ser diretamente generalizada para o caso em que os resistores são correlacionados espacialmente, procedimento que será realizado na seção seguinte, ela contém implicitamente as simetrias da rede quadrada, dificultando não só uma extrapolação para o limite contínuo como também uma conexão mais clara com a função de correlação termodinâmica $\langle \phi(\vec{x}) \phi(\vec{x}') \rangle$. Logo, no que se segue, optamos por iniciar uma abordagem própria e nova em relação à condutividade das "redes contínuas" de resistores correlacionados, mantendo apenas o espírito da formulação de Blackman de uma expansão perturbativa em potências do contraste entre as condutividades microscópicas.

Consideramos a "rede contínua" como uma versão grossamente granulada (do inglês *coarse grained*) da rede tradicional: em cada grão, denotado pela posição \vec{x} , há um resistor microscópico cuja condutividade relaciona-se com o parâmetro de ordem escalar local $\phi(\vec{x})$ de acordo com:

$$\sigma\left(\vec{x},t\right) = \sigma_0\left[1 + g\phi\left(\vec{x},t\right)\right],\tag{3.13}$$

em que σ_0 é a condutividade média do sistema e $g \ll 1$ é a constante de acoplamento que mede o contraste entre as condutividades das diferentes fases, as quais assumimos possuírem valores próximos. É importante salientar que, para esta fórmula fazer sentido, é necessário que o parâmetro de ordem escalar esteja normalizado a 1, de modo que a fase na qual todos os "pseudo-spins" apontam para cima ($\phi > 0$) tenha condutividade $\sigma_> = \sigma_0(1 + g)$, enquanto a fase com todos os "pseudo-spins" direcionados para baixo ($\phi < 0$) possua condutividade $\sigma_< = \sigma_0(1 - g)$. Dessa maneira, fica clara a interpretação da constante g como sendo o contraste, 3.3. Redes de resistores correlacionados e expansão perturbativa da condutividade



Figura 3.11. Grão condutor de uma rede de resistores quadrada grossamente granulada, cuja condutividade é dada por $\sigma(\vec{x}, t)$. Um potencial externo local $U_{ext}(\vec{x}, t)$ lhe é aplicado através de um capacitor de capacitância C_0 . Na figura, também são esquematizadas as correntes que entram e saem do grão, as quais obedecem à equação de Kirchhoff $I_1 + I_2 = I_3 + I_4$.

 $g = \frac{\sigma_{\geq} - \sigma_{\leq}}{\sigma_{\geq} + \sigma_{\leq}}$. Daqui por diante, a menos que explicitemos o contrário, assumimos que ϕ está normalizado, para simplificar a notação.

Assim como no caso da rede aleatória, a cada resistor é aplicado um potencial externo $U_{ext}(\vec{x},t)$ através de um capacitor de capacitância C_0 , como esquematizado na figura 3.11. No limite contínuo, as equações de Kirchhoff, que descrevem a conservação da corrente elétrica que passa por cada grão, assumem a forma de uma equação de continuidade local:

$$\frac{\partial \rho\left(\vec{x},t\right)}{\partial t} - \vec{\nabla} \cdot \left[\sigma\left(\vec{x},t\right)\vec{\nabla}U\left(\vec{x},t\right)\right] = 0, \qquad (3.14)$$

em que $\rho(\vec{x},t)$ refere-se à densidade de carga em cada grão. Na equação anterior, usamos o fato de a densidade de corrente local ser dada por $\vec{J}(\vec{x},t) = -\sigma(\vec{x},t) \, \vec{\nabla} U(\vec{x},t)$, com $U(\vec{x},t)$ denotando o potencial elétrico local. Esta relação, válida localmente devido ao granulamento realizado na rede microscópica, não deve ser confundida com a lei de Ohm macroscópica $J_{\vec{q},\omega} = i\Sigma \vec{q} U_{\vec{q},\omega}^{(ext)}$, que será usada mais adiante. Devido ao acoplamento com o capacitor, a densidade de carga é proporcional à diferença de potencial:

$$\rho(\vec{x}, t) = C[U(\vec{x}, t) - U_{ext}(\vec{x}, t)], \qquad (3.15)$$

em que $C = C_0/V$ é a capacitância específica (V denota o volume do sistema). Portanto, substituindo (3.15) em (3.14), obtemos a equação que relaciona o potencial local com o potencial externo:

$$\hat{\mathcal{G}}^{-1}U\left(\vec{x},t\right) = C \frac{\partial U_{ext}\left(\vec{x},t\right)}{\partial t},$$
(3.16)

na qual definimos o operador diferencial:

$$\hat{\mathcal{G}}^{-1} = C \frac{\partial}{\partial t} - \vec{\nabla} \cdot \left[\sigma \left(\vec{x}, t \right) \vec{\nabla} \right] \,, \tag{3.17}$$

que descreve a difusão eletrônica ao longo do sistema. De posse de (3.17) e (3.15), podemos

escrever a densidade de carga apenas como função do potencial externo. Projetando esta relação no espaço de Fourier, temos:

$$\rho_{\vec{q},\omega} = -C \left[i\omega C \mathcal{G}_{\vec{q},\omega} + 1 \right] U^{(ext)}_{\vec{q},\omega} \,. \tag{3.18}$$

Na equação acima, $\mathcal{G}_{\vec{q},\omega}$ é o elemento de matriz diagonal do operador (3.17) na representação de Fourier. Para determinarmos a condutividade macroscópica do sistema, basta comparar a expressão (3.18) com a equação macroscópica de continuidade:

$$i\omega\rho_{\vec{q},\omega} = \Sigma q^2 U^{(ext)}_{\vec{q},\omega} \,. \tag{3.19}$$

Assim, obtemos o resultado:

$$\Sigma = \lim_{\omega \to 0} \lim_{k \to 0} \frac{\omega^2 C^2}{q^2} \operatorname{Re}\left[\mathcal{G}_{\vec{q},\omega}\right], \qquad (3.20)$$

em que a ordem dos limites é fundamental para a correta determinação da condutividade dc. A expressão geral (3.20) é equivalente àquela obtida por Stephen em [99] para o caso de uma rede discreta. Portanto, nota-se que o cálculo da condutividade reduz-se à diagonalização do operador diferencial $\hat{\mathcal{G}}$. No nosso caso de interesse, em que a condutividade microscópica é dada por (3.13) e $g \ll 1$, este cálculo pode ser realizado perturbativamente. Para isso, escrevemos:

$$\hat{\mathcal{G}}^{-1} = \hat{\mathcal{G}}_0^{-1} - g\hat{\mathcal{V}}, \qquad (3.21)$$

em que introduzimos o propagador de difusão homogêne
a $\hat{\mathcal{G}}_0$ e a perturbação inomogêne
a $\hat{\mathcal{V}},$ dados por:

$$\hat{\mathcal{G}}_{0}^{-1} = C \frac{\partial}{\partial t} - \sigma_{0} \nabla^{2}$$
$$\hat{\mathcal{V}} = \sigma_{0} \vec{\nabla} \cdot \left[\phi \left(\vec{x}, t \right) \vec{\nabla} \right] .$$
(3.22)

Logo, como $g \ll 1$, a equação (3.21) possui a solução formal perturbativa:

$$\hat{\mathcal{G}} = \sum_{n=0}^{\infty} g^n \left(\hat{\mathcal{G}}_0 \hat{\mathcal{V}} \right)^n \hat{\mathcal{G}}_0 \,. \tag{3.23}$$

A projeção dos operadores diferenciais (3.22) no espaço de Fourier é obtida de maneira direta, usando as suas representações no espaço real. O propagador homogêneo é dado por:

$$\hat{\mathcal{G}}_{\vec{q}_{1},\omega_{1};\vec{q}_{2},\omega_{2}}^{(0)} \stackrel{-1}{=} \frac{1}{V} \int d^{d}x_{1} d^{d}x_{2} dt_{1} dt_{2} \mathrm{e}^{-i(\vec{q}_{1}\cdot\vec{x}_{1}-\omega_{1}t_{1})} \\ \left(C\frac{\partial}{\partial t_{1}}-\sigma_{0}\nabla_{1}^{2}\right) \left[\delta\left(\vec{x}_{1}-\vec{x}_{2},t_{1}-t_{2}\right)\mathrm{e}^{i(\vec{q}_{2}\cdot\vec{x}_{2}-\omega_{2}t_{2})}\right] \\ \hat{\mathcal{G}}_{\vec{q}_{1},\omega_{1};\vec{q}_{2},\omega_{2}}^{(0)} = \left(-i\omega_{1}C+\sigma_{0}q_{1}^{2}\right)\delta_{\vec{q}_{1},\vec{q}_{2}}\delta_{\omega_{1},\omega_{2}}, \qquad (3.24)$$

enquanto o operador perturbativo:

3.3. Redes de resistores correlacionados e expansão perturbativa da condutividade

Assim, de posse dos operadores (3.24) e (3.25), além da solução (3.23) e da fórmula (3.20), podemos obter a condutividade em qualquer ordem de potência da constante de acoplamento g. Em segunda ordem, temos:

$$\Sigma = \sigma_0 \left[1 + g\phi_{\vec{q}=0,\omega=0} - g^2 \sigma_0^2 \sum_{\vec{k},\nu} \frac{k^2 \left(\hat{q} \cdot \vec{k}\right)^2}{(\nu^2 C^2 + \sigma_0^2 k^4)} \phi_{\vec{k},\nu} \phi_{-\vec{k},-\nu} \right].$$
(3.26)

Esta expressão é uma versão contínua da fórmula de Blackman (3.10), generalizada para o caso de resistores espacialmente correlacionados. Trata-se da condutividade correspondente à configuração específica $\phi(\vec{x}, t)$ e, portanto, ainda necessita ser promediada apropriadamente. Há duas possibilidades para se tomar a média de Σ , que denominaremos Σ_{av} : no caso em que o elétron se difunde mais rápido do que o parâmetro de ordem muda - isto é, o campo $\phi(\vec{x}, t)$ está congelado no referencial do elétron - é preciso fazer uma média do tipo quenched. Como a densidade de probabilidade associada à configuração ϕ é governada pelo fator de Boltzmann $\exp(-\mathcal{H}[\phi])$, basta tomar as usuais médias termodinâmicas sobre as quantidades relevantes:

$$\Sigma_{av} = \sigma_0 \left[1 + g \left\langle \phi_{\vec{q}=0,\omega=0} \right\rangle - g^2 \sigma_0^2 \sum_{\vec{k},\nu} \frac{k^2 \left(\hat{q} \cdot \vec{k} \right)^2}{(\nu^2 C^2 + \sigma_0^2 k^4)} \left\langle \phi_{\vec{k},\nu} \phi_{-\vec{k},-\nu} \right\rangle \right] \,. \tag{3.27}$$

No caso em que ϕ descrever um sistema que sofre uma transição de segunda ordem, a média quenched será necessária toda vez que o expoente dinâmico z for maior que 2 (para uma revisão sobre fenômenos críticos dinâmicos, ver [104]). O argumento é bastante simples: considere uma região do sistema com tamanho da ordem do comprimento de correlação ξ . O tempo gasto pelo elétron para se difundir sobre ela pode ser estimado por $t_{el} \sim D_0^{-1}\xi^2$, em que $D_0 = \sigma_0/C$ é o coeficiente de difusão do sistema homogêneo. Já o tempo necessário para o parâmetro de ordem "girar" em toda a região correlacionada é estimado por $t_{\phi} \sim \Gamma^{-1}\xi^z$, com Γ denotando o coeficiente de difusão apropriado. Assim, para z > 2, temos $t_{\phi} \gg t_{el}$, o que significa que a configuração termodinâmica não é praticamente alterada durante a passagem da corrente.

Na situação oposta em que $t_{el} \ll t_{\phi}$, o elétron é capaz de sondar todas as configurações termodinâmicas do sistema. Logo, é necessário tomar a média tipo *annealed* sobre o parâmetro de ordem:

$$\Sigma_{av} = \sigma_0 \left[1 + g\bar{\phi}_{\vec{q}=0,\omega=0} - g^2 \sigma_0^2 \sum_{\vec{k},\nu} \frac{k^2 \left(\hat{q} \cdot \vec{k}\right)^2}{(\nu^2 C^2 + \sigma_0^2 k^4)} \bar{\phi}_{\vec{k},\nu} \bar{\phi}_{-\vec{k},-\nu} \right], \qquad (3.28)$$

em que introduzimos a notação \overline{A} para denotar a média termodinâmica sobre A, ao invés da

notação anterior $\langle A \rangle$, apenas para diferenciar explicitamente os casos quenched e annealed. A principal diferença entre as duas médias é que, enquanto a primeira contém informações sobre as correlações do parâmetro de ordem em diferentes regiões, a última só é sensível ao seu valor médio.

Das expressões (3.27) e (3.28), fica claro que efeitos da dinâmica do parâmetro de ordem sobre a difusão eletrônica só se manifestam a partir do termo de segunda ordem. Daqui por diante, a não ser que afirmemos o contrário, assumimos um campo escalar que não depende explicitamente do tempo. Desse modo, a expressão da condutividade referente à média *quenched* assume uma forma mais simples:

$$\Sigma_{av} = \sigma_0 \left[1 + g \left\langle \phi_{\vec{q}=0} \right\rangle - g^2 \sum_{\vec{k}} \left(\hat{q} \cdot \hat{k} \right)^2 \left\langle \phi_{\vec{k}} \phi_{-\vec{k}} \right\rangle \right], \qquad (3.29)$$

bem como a referente à média annealed:

$$\Sigma_{av} = \sigma_0 \left[1 + g\bar{\phi}_{\vec{q}=0} - g^2 \sum_{\vec{k}} \left(\hat{q} \cdot \hat{k} \right)^2 \bar{\phi}_{\vec{k}} \bar{\phi}_{-\vec{k}} \right] \,. \tag{3.30}$$

Estas são as fórmulas que relacionam o transporte dos elétrons com a termodinâmica do sistema inomogêneo no qual eles circulam. É importante salientar que trata-se de uma teoria difusiva para a condutividade, e não de um modelo balístico, como o de Drude, por exemplo. Esse formalismo será mais explorado no contexto das fases de listras previstas pela Hamiltoniana de Brazovskii (3.9) durante a seção 3.5, quando procuraremos relacioná-lo aos já mencionados dados experimentais envolvendo os cupratos e os niquelatos.

Por fim, outro resultado advindo da expansão perturbativa (3.23) refere-se ao modo como a condutividade macroscópica escala com os parâmetros termodinâmicos relevantes, no caso em que o sistema possui um ponto crítico. No âmbito da abordagem de campo médio, como $g \ll 1$, a série (3.23) converge e uma simples contagem de expoentes é suficiente. O cálculo é direto; para o caso de um campo estático, obtemos:

$$\Sigma\left(\sigma_{0}, g, \tau, h\right) = b^{2-d} \Sigma\left(\sigma_{0} b^{d-2}, g b^{-\beta/\nu}, \tau b^{1/\nu}, h b^{\beta\delta/\nu}\right), \qquad (3.31)$$

enquanto para o caso dinâmico:

$$\Sigma(\sigma_0, g, C_0, \tau, h) = b^{2-d} \Sigma\left(\sigma_0 b^{d-2}, g b^{-\beta/\nu}, C_0 b^{-z}, \tau b^{1/\nu}, h b^{\beta\delta/\nu}\right).$$
(3.32)

Nas fórmulas anteriores, os expoentes β , $\delta \in \nu$, bem como os parâmetros $\tau \in h$, são os mesmos definidos anteriormente em (1.15). O fator b > 1 é o parâmetro de re-escalonamento, de modo que $\vec{x}' = \vec{x}/b$ e $t' = t/b^z$ são as novas escalas de comprimento e de tempo do sistema grossamente granulado. Notamos que a constante de acoplamento g é uma variável irrelevante, que escala com o mesmo expoente β do parâmetro de ordem. Vemos também que o único efeito do expoente dinâmico z é renormalizar a capacitância C_0 , que está relacionada à constante de difusão do sistema homogêneo. Vale salientar também que o escalonamento da condutividade com b^{2-d} é uma conseqüência intrínseca da definição geométrica desta quantidade [95].

3.4. Transporte em compostos não-dopados: classe de universalidade da transição térmica

Antes de particularizarmos o formalismo desenvolvido na seção anterior para o caso dos isolantes de Mott dopados, vamos tomá-lo como embasamento para revisitar os experimentos [73, 74], nos quais a classe de universalidade do ponto crítico de Mott a temperaturas finitas em 3D e 2D é investigada mediante medidas de condutividade. Conforme discutido na seção 3.2, trabalhos teóricos indicam que a transição deveria pertencer à classe de Ising [71, 72]. Assim, qualquer que fosse a origem microscópica do parâmetro de ordem, ele seria descrito por um campo escalar $\phi(\vec{x})$ associado a uma rede de pseudo-spins S_i subjacente. Vale salientar que este pseudo-spin não está associado a um elétron do modelo de Hubbard original, mas sim a um grão que engloba ou uma região metálica, em que vários sítios duplamente ocupados estão presentes, ou uma região isolante, em que predominam sítios ocupados por um elétron apenas. Logo, um ponto com pseudo-spin para cima $(S_i = 1)$ corresponderia a uma região metálica do sistema, enquanto um ponto com pseudo-spin para baixo $(S_i = -1)$ referir-se-ia a uma região isolante.

Caso seja assumida uma relação linear entre a diferença de condutividade $\Delta \Sigma = \Sigma - \Sigma_c$ e o parâmetro de ordem de Ising, $\Delta \Sigma \sim \phi$, então as conclusões delineadas em [74] para o caso de um isolante de Mott bidimensional (o sal orgânico) estariam corretas, e a classe de universalidade da transição de Mott não poderia ser a de Ising. Contudo, vamos considerar, momentaneamente, que haja um outro expoente $\theta \neq 1$ caracterizando esta relação, $\Delta \Sigma \sim \phi^{\theta}$. Isto acontece, por exemplo, em alguns metais magnéticos próximo da temperatura de Curie, em que as simetrias associadas à definição da condutividade microscópica impedem que Σ se acople a potências ímpares do parâmetro de ordem magnético [105]. Recapitulando as definições dos expoentes³ β , $\delta \in \gamma$:

$$\begin{split} \phi\left(\tau,h=0\right) &\sim |\tau|^{\beta} \\ \phi\left(\tau=0,h\right) &\sim |h|^{1/\delta} \\ \frac{\partial\phi(\tau,h)}{\partial h}\bigg|_{h=0} &\sim |\tau|^{-\gamma} , \end{split}$$
(3.33)

chegamos diretamente às seguintes relações entre os expoentes da condutividade (3.1) e os do parâmetro de ordem:

$$\beta_{\sigma} = \theta \beta, \qquad \delta_{\sigma} = \delta/\theta, \qquad \gamma_{\sigma} = \gamma + \beta(1-\theta).$$
 (3.34)

Comparando os valores dos expoentes obtidos por Kagawa *et al.* para os sais orgânicos, $\beta_{\sigma} \simeq 1$, $\delta_{\sigma} \simeq 2$ e $\gamma_{\sigma} \simeq 1$, com os valores esperados para a classe de universalidade de Ising em 2D, $\beta = 1/8$, $\delta = 15$ e $\gamma = 7/4$, nota-se que o mesmo $\theta \approx 8$ resolveria as três equações simultaneamente (dentro das margens de erros das medidas experimentais). Além disso, a relação de escala $\gamma_{\sigma} = \beta_{\sigma} (\delta_{\sigma} - 1)$ observada seria conseqüência trivial da relação de escala dos expoentes de Ising, $\gamma = \beta (\delta - 1)$. Assim, desde que mostrássemos microscopicamente que

³ Conforme definimos anteriormente, a relação entre os parâmetros da Hamiltoniana efetiva e as grandezas experimentais é $\tau \sim T - T_c$ e $h \sim P - P_c$

 $\Delta\Sigma \sim \phi^8$, poderíamos concluir que os resultados experimentais de [74] confirmam que a transição de Mott pertence à classe de Ising.

Um tipo de sistemas nos quais a condutividade macroscópica não escala linearmente com o parâmetro de ordem subjacente são as já mencionadas redes de resistores aleatórios, na situação específica em que uma das condutividades microscópicas é nula. Neste caso, devido à estrutura fractal do aglomerado percolativo incipiente, altamente ramificado em caminhos sem saída que não conduzem corrente, a condutividade não é linearmente proporcional à densidade de ligações condutoras (mais detalhes encontram-se no Apêndice D). Mesmo para o caso em que os resistores microscópicos não estão aleatoriamente distribuídos, mas estão correlacionados segundo o modelo de Ising, simulações numéricas recentes mostram que, no limiar da transição percolativa, a condutividade global vai a zero com o expoente $\beta_{\sigma} = 0, 2 \neq 1/8$ [102].

Contudo, no caso concreto dos sais orgânicos, a condutividade da fase isolante nunca se anula, devido ao fato de a temperatura ser finita. Assim, a condutividade total não vai a zero e a transição percolativa do sistema torna-se menos relevante para a compreensão das propriedades de transporte. Portanto, o limite que devemos considerar é o oposto, no qual o contraste entre as condutividades microscópicas de cada fase é pequeno, e a termodinâmica do parâmetro de ordem é essencial. Neste caso, podemos usar o formalismo desenvolvido na seção anterior, e, em particular, tomar a média quenched (3.29) para a condutividade macroscópica, já que o expoente dinâmico z do modelo de Ising puramente dissipativo (modelo A, de Glauber) é maior que 2 [104].

No entanto, usando tal expressão, fica claro que, em ordem mais baixa da teoria de perturbação, a diferença de condutividade escala linearmente com o parâmetro de ordem. A origem desta proporcionalidade linear não reside apenas no fato de o contraste g ser muito pequeno, mas de termos assumido, inicialmente, que a condutividade microscópica da região metálica (isolante) com spin para cima (baixo) fosse proporcional ao parâmetro de ordem:

$$\sigma_i = \sigma_0 \left(1 + gS_i \right) \,. \tag{3.35}$$

Entretanto, uma análise um pouco mais detalhada do problema mostra que a condutividade microscópica depende não apenas do parâmetro de ordem, mas contém também um termo proporcional à densidade de energia. Para ver isso, consideremos um toy model no qual os spins estão localizados nos sítios de uma rede com simetria qualquer, de modo que o spin para cima esteja associado a um resistor microscópico de condutividade σ_M e o spin para baixo, a um resistor de condutividade $\sigma_I < \sigma_M$. A condutividade da ligação entre dois sítios vizinhos pode assumir três valores possíveis, dependendo se a ligação em série entre os resistores dos sítios corresponder às configurações de spin $(\uparrow\uparrow), (\downarrow\downarrow)$ ou $(\uparrow\downarrow)/(\downarrow\uparrow)$, conforme ilustra a figura 3.12. Assim, a condutividade de uma ligação (i, j) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\sigma_{ij} = \sigma_0 \left[1 + g_\phi \left(S_i + S_j \right) + g_\epsilon S_i S_j \right], \qquad (3.36)$$

em que $\sigma_0 = \frac{1}{4} (\sigma_M + \sigma_I) + \frac{\sigma_M \sigma_I}{\sigma_M + \sigma_I}, g_{\phi} = \frac{\sigma_M - \sigma_I}{4\sigma_0}$ e $g_{\epsilon} = \frac{(\sigma_M - \sigma_I)^2}{4\sigma_0(\sigma_M + \sigma_I)}$. Quando o contraste é alto, $\sigma_M \gg \sigma_I$, temos $g_{\phi} \approx g_{\epsilon} \approx 1$, enquanto que, para o caso de contraste baixo, $\sigma_M - \sigma_I \ll \sigma_I$, obtemos $g_{\epsilon} < g_{\phi} \to 0$.



Figura 3.12. Rede quadrada de resistores correlacionados pelo modelo de Ising: spins para cima indicam regiões metálicas, de condutividade σ_M , enquanto spins para baixo estão associados às regiões isolantes, de condutividade σ_I . A condutividade de uma ligação entre primeiros vizinhos é calculada considerando-se a combinação em série dos resistores correspondentes aos sítios.

Portanto, a partir deste exemplo bastante simplificado, notamos que a expressão correta da condutividade microscópica que devemos analisar, no caso do isolante de Mott puro, é dada por (3.36), que apresenta duas constantes de acoplamento distintas. Através de uma análise mais profunda do problema, além do toy model anterior, notamos que a inclusão do termo S_iS_j corresponde a levar em conta a contribuição do espalhamento dos elétrons pelas interfaces dos grãos metálicos ou isolantes. A relevância de tal contribuição, medida pela constante de acoplamento g_{ϵ} , em relação à contribuição do contraste entre as duas fases, medida pelo acoplamento g_{ϕ} , será fundamental para a compreensão do comportamento crítico da condutividade.

Assim, temos agora o problema de uma rede de resistores correlacionados pelo modelo de Ising, cujas condutividades locais estão acopladas ao parâmetro de ordem local segundo a fórmula (3.36). Da análise da expansão perturbativa da condutividade global (3.29), vemos que ela deverá ser proporcional, em ordem dominante, ao valor médio do parâmetro de ordem $\langle S_i \rangle$ e à densidade de energia $\langle S_i S_j \rangle$, em que j denota um primeiro vizinho de i:

$$\Sigma_{av} \approx \sigma_0 \left[1 + 2g_\phi \left\langle S_i \right\rangle + g_\epsilon \left\langle S_i S_j \right\rangle \right] \,, \tag{3.37}$$

Portanto, inferimos que, para o caso em que $g_{\phi} \gg g_{\epsilon}$, o termo proporcional ao parâmetro de ordem será o dominante, e a diferença de condutividade $\Delta \Sigma = \Sigma - \sigma_0$ será linearmente proporcional ao parâmetro de ordem $\langle S_i \rangle$, de modo que $\Delta \Sigma (\tau, h = 0) \sim |\tau|^{\beta}$. Porém, no caso oposto em que $g_{\phi} \ll g_{\epsilon}$, $\Delta \Sigma$ deverá ser proporcional à densidade de energia $\langle S_i S_j \rangle \sim |\tau|^{1-\alpha}$, implicando em $\Delta \Sigma (\tau, h = 0) \sim |\tau|^{1-\alpha} = |\tau|^{\beta\theta}$, com $\theta = (1 - \alpha)/\beta$, que assume exatamente o valor 8 para o caso do modelo de Ising em duas dimensões (os valores dos expoentes críticos encontram-se na tabela 3.1 apresentada anteriormente).

Ao invés de prosseguirmos com esta análise, resultante da aplicação da expressão (3.29), achamos mais conveniente, para o problema em questão, generalizar a formulação de Blackman [103] para o caso de resistores correlacionados, uma vez que ela se refere a uma rede quadrada, para a qual a solução exata do modelo de Ising em duas dimensões é conhecida - é a consagrada solução de Onsager [106]. Assim, aplicamos a expansão (3.10) até ordem quadrática, considerando apenas a contribuição de ligações vizinhas, já que as funções $\Gamma_{\alpha\beta}$ decaem rapidamente com a distância. Tomando a média quenched e considerando o contraste $\Delta_{ij} = g_{\phi} \left(S_i + S_j\right) + g_{\epsilon} S_i S_j, \text{ obtemos:}$

$$\frac{\Sigma_{av}}{\sigma_0} = 1 + 2g_{\phi} \left(1 - 2\Gamma_{01}g_{\epsilon}\right) \langle S_i \rangle + g_{\epsilon} \langle S_i S_{i+x} \rangle + 2\Gamma_{01} \left[g_{\phi}^2 \left(2 \langle S_i S_{i+x+y} \rangle - \langle S_{i-x} S_{i+x} \rangle\right) + 2g_{\phi}g_{\epsilon} \left(2 \langle S_i S_{i+x} S_{i+x+y} \rangle - \langle S_{i-x} S_i S_{i+x} \rangle\right) - g_{\epsilon}^2 \left(\langle S_{i-x} S_{i+x} \rangle - \langle S_i S_{i+x} S_{i+y} S_{i+x+y} \rangle\right) - 2\Gamma_{01}g_{\phi}^2,$$
(3.38)

em que $\Gamma_{01} \approx -0,137$ e $S_{i+\delta}$ denota um dos quatro primeiros vizinhos do spin localizado no sítio *i*, os quais associamos a $\delta = \pm x, \pm y$. A vantagem em se usar esta fórmula, referente à rede quadrada, é que todas as funções de correlação que nela aparecem possuem expressões exatas, oriundas da solução de Onsager para o modelo de Ising bidimensional. Para expressá-las, é conveniente introduzirmos a variável:

$$k = \sinh^{-2} \left(\frac{2J}{k_B T}\right) \,. \tag{3.39}$$

Assim, a temperatura crítica do sistema na ausência de campos externos

$$\frac{1}{T_c} = \frac{\ln(1+\sqrt{2})}{2}, \qquad (3.40)$$

pode ser expressa simplesmente por $k_c = 1$. As várias funções de correlação que aparecem em (3.38), referentes ao caso em que h = 0, são encontradas na literatura referente à solução de Onsager [107, 108, 109, 110, 111, 112, 113]. A magnetização, para $k < k_c$, é dada por:

$$\langle S_i \rangle = \left(1 - k^2\right)^{1/8}$$
 (3.41)

Já as funções de correlação de dois pontos não-conectadas são expressas pelas fórmulas:

$$\langle S_i S_{i+x} \rangle = \sqrt{1+k} \left[\frac{1}{2} + \left(\frac{1-k}{\pi} \right) K(k) \right]$$

$$\langle S_i S_{i+x+y} \rangle = \frac{2}{\pi} E(k)$$

$$\langle S_{i-x} S_{i+x} \rangle = \frac{k+1}{2} - \frac{1}{\pi^2 k} \left[4E^2(k) + 8 \left(k^2 - 1 \right) E(k) K(k) \right.$$

$$+ 2 \left(k^2 - 1 \right) \left(k - 1 \right) \left(k + 2 \right) K^2(k) \right] ,$$

$$(3.42)$$

em que introduzimos as funções elípticas completas de primeira e segunda espécies:

$$K(k) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}}$$

$$E(k) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta} d\theta.$$
(3.43)

A função de correlação de três pontos é proporcional à magnetização:

3.4. Transporte em compostos não-dopados: classe de universalidade da transição térmica

$$\langle S_i S_{i+x} S_{i+x+y} \rangle = \langle S_{i-x} S_i S_{i+x} \rangle = \alpha \langle S_i \rangle , \qquad (3.44)$$

em que definimos o fator $\alpha < 1$:

$$\alpha = 2 \left(A_s + B_s \right) \left[1 + \frac{(1 - 4A_s)}{4B_s} \right] \,, \tag{3.45}$$

com:

$$A_{s} = \frac{1}{8} \left[\tanh\left(\frac{4J}{k_{B}T}\right) + 2 \tanh\left(\frac{2J}{k_{B}T}\right) \right]$$

$$B_{s} = \frac{1}{8} \left[\tanh\left(\frac{4J}{k_{B}T}\right) - 2 \tanh\left(\frac{2J}{k_{B}T}\right) \right].$$
(3.46)

Já a função de correlação de quatro pontos é obtida em termos das funções de dois pontos definidas em (3.42):

$$\left\langle S_i S_{i+x} S_{i+y} S_{i+x+y} \right\rangle = 2 \left\langle S_i S_{i+x} \right\rangle^2 - \left\langle S_i S_{i+x+y} \right\rangle^2.$$
(3.47)

Estas propriedades das funções de correlação de mais de dois spins podem ser entendidas à luz da expansão em produtos de operadores (OPE, do inglês *operator product expansion*). Segundo a OPE, perto do ponto crítico, as contribuições mais singulares dos valores médios dos operadores de múltiplos spins devem ser proporcionais aos operadores mais primários e singulares do modelo de Ising - a saber, a magnetização, no caso de um operador com número ímpar de spins, e a densidade de energia, no caso de um número par.

Logo, para qualquer temperatura abaixo da crítica, temos uma expressão perturbativa para a condutividade da rede quadrada de resistores correlacionados segundo o modelo de Ising. Nosso objetivo é investigar o que acontece com o seu comportamento crítico nos limites opostos $g_{\phi} \gg g_{\epsilon}$ e $g_{\phi} \ll g_{\epsilon}$, considerando, obviamente, que ambas as constantes de acoplamento são menores do que 1. Para auxiliar esta análise, simulações numéricas da rede correlacionada foram realizadas por dois colaboradores: S. Papanikolaou, do grupo do Prof. Eduardo Fradkin, da Universidade de Urbana, e R. Sknepnek, do grupo do Prof. Joerg Schmalian, do Laboratório de Ames. Foram simuladas, pelo método de Monte Carlo, tanto redes quadradas quanto redes triangulares, para nos certificarmos de que as propriedades observadas eram de fato universais, e não devido a alguma simetria da rede subjacente. As simulações consistem, num primeiro momento, em equilibrar uma rede de spins de tamanho L na temperatura crítica, usando o algoritmo de Wolff [114]. Após essa etapa, toma-se a rede de resistores equivalente à configuração de spins obtida e calcula-se sua condutividade macroscópica, usando o algoritmo de Frank-Lobb [115] ou resolvendo numericamente as equações de Kirchhoff. As condutividades microscópicas equivalentes às regiões metálica $(S_i = 1)$ e isolante $(S_i = -1)$ são obtidas a partir da relação geral (3.36) e dadas por $\sigma_M = 2\sigma_0 (1 + 2g_\phi + g_\epsilon)$ e $\sigma_I = 2\sigma_0 (1 - 2g_\phi + g_\epsilon)$.

Para valores pequenos das constantes de acoplamento, observamos uma excelente concordância entre as simulações da rede quadrada e a fórmula perturbativa baseada na solução de Onsager (3.38), com desvios menores que 1%, como ilustra a figura 3.13. Na mesma figura, vemos tam-

105



Figura 3.13. Condutividade Σ de uma rede de resistores correlacionados segundo o modelo de Ising em função da magnetização total da configuração de spins M. Os pontos referem-se a dados obtidos por simulação numérica, enquanto a linha cheia corresponde à equação perturbativa (3.38). No gráfico à esquerda, tem-se $g_{\phi} = 0,005$ e $g_{\epsilon} = 0,1$, enquanto, no gráfico à direita, $g_{\phi} = 0,005$ e $g_{\epsilon} = 0,95$.

bém que, conforme era esperado, tal concordância não acontece para o caso em que uma das constantes de acoplamento é grande, implicando em desvios de até 40%.

Conforme discutido anteriormente, baseados nas expansões perturbativas da condutividade (3.37) e (3.38), espera-se que, para diferentes valores da razão entre as constantes de acoplamento g_{ϕ}/g_{ϵ} , a diferença de condutividade $\Delta \Sigma = \Sigma - \Sigma_c$ vá a zero em $T = T_c$ com diferentes expoentes: $\beta_{\sigma} = \beta = 1/8$, para $g_{\phi} \gg g_{\epsilon}$, e $\beta_{\sigma} = 1 - \alpha = 1$, para $g_{\phi} \ll g_{\epsilon}^4$. No caso específico de $g_{\phi} \ll g_{\epsilon}$, esperamos que a condutividade apresente um comportamento do tipo *crossover* conforme o sistema adentre a região crítica. A partir das expansões perturbativas anteriores, como o expoente $\beta = 1/8$ é menor que o expoente $1 - \alpha = 1$, esperamos que o expoente β_{σ} mude de 1 para 1/8 conforme a temperatura do sistema aumenta e ele se aproxima do ponto crítico. Assim, o sistema passaria de uma região em que a criticalidade é dominada pela densidade de energia, para outra na qual ela é governada pelo parâmetro de ordem.

O crossover entre estes dois regimes distintos é confirmado claramente pelas simulações numéricas, como ilustra a figura 3.14. Neste caso, a aproximação da região crítica não se dá pela mudança da temperatura do sistema - que é mantida sempre em T_c - mas pela alteração no seu tamanho L. De acordo com a teoria de escala em sistemas finitos, o comportamento crítico da condutividade no limite termodinâmico $\Delta \Sigma \sim |\tau|^{\beta_{\sigma}}$ é traduzido para $\Delta \Sigma \sim L^{\beta_{\sigma}/\nu}$, no caso de um sistema de extensão limitada [30]. Portanto, a partir das simulações, é possível extrair o expoente β_{σ} . Na figura 3.14, referente ao caso $g_{\phi} = 10^{-3}$ e $g_{\epsilon} = 10^{-2}$, notamos a mudança drástica no comportamento crítico da condutividade, conforme o sistema se aproxima do ponto crítico. Vale salientar, mais uma vez, que o crossover só ocorre para valores pequenos das constantes de acoplamento; no caso em que o contraste é alto, como mostra o destaque da mesma figura, o expoente β_{σ} não assume nenhum dos dois valores anteriores, e sim um outro valor ligado às propriedades da percolação dos aglomerados de spin que apontam na mesma direção (este mesmo valor já havia sido obtido em [102]).

O crossover entre dois regimes distintos também é refletido nas diferenças entre os comportamentos críticos das partes par e ímpar da condutividade macroscópica. Conforme as expansões perturbativas anteriores, podemos separar a diferença de condutividade em duas componentes,

 $^{^4}$ Estamos desprezando a fraca dependência logarítmica que surge em duas dimensões, quando lpha=0.



Figura 3.14. Comportamento de crossover da diferença de condutividade $\Sigma - \Sigma_0$ (em unidades de Σ_0), apresentada em função do comprimento linear L (em unidades do parâmetro de rede) da rede de resistores correlacionados segundo o modelo de Ising, para $g_{\phi} = 10^{-3}$ e $g_{\epsilon} = 10^{-2}$. Para escalas longas, a criticalidade é dominada pelo parâmetro de ordem ($\beta_{\sigma} \approx 0, 125$), enquanto para distâncias curtas, ela é governada pela densidade de energia ($\beta_{\sigma} \approx 1, 0$). No destaque, o comportamento crítico da condutividade para o caso de contraste elevado $g_{\phi} = g_{\epsilon} = 0.999999$, em que $\beta_{\sigma} \approx 0, 2$. As curvas cheias são ajustes aos pontos obtidos por simulação numérica.

de acordo com o sinal sob inversão da magnetização: uma par, Σ^{even} , que só pode depender de g_{ϵ} , e uma ímpar, Σ^{odd} , dependente apenas de g_{ϕ} . Na figura 3.15, mostramos os comportamentos críticos destes dois termos, extraídos das simulações numéricas, confirmando que Σ^{even} é caracterizada pelo expoente $\beta_{\sigma} = 1 - \alpha = 1$, enquanto Σ^{odd} , pelo expoente $\beta_{\sigma} = \beta = 1/8$.

Portanto, o acoplamento da condutividade microscópica (3.36) com a densidade de energia é capaz de explicar o "expoente anômalo" $\theta = 8$ que sugerimos no início da seção para compreender os resultados experimentais de [74]. Antes de prosseguirmos numa análise mais detalhada deste experimento, é instrutivo notar como a relação de escala (3.31), obtida a partir da fórmula perturbativa, é capaz de precisar o fenômeno de *crossover* entre dois regimes distintos. Para o caso atual, em que há duas constantes de acoplamento e a rede é bidimensional, podemos reescrever a relação de escala da condutividade como:

$$\Sigma\left(\tau, h, g_{\phi}, g_{\epsilon}\right) = \Sigma\left(\tau b^{\frac{1}{\nu}}, h b^{\frac{\beta\delta}{\nu}}, g_{\phi} b^{-\frac{\beta}{\nu}}, g_{\epsilon} b^{-\frac{1-\alpha}{\nu}}\right), \qquad (3.48)$$

Vamos obter o expoente β_{σ} ; a diferença de condutividade, para h = 0, é definida como:

$$\Delta\Sigma\left(\tau, 0, g_{\phi}, g_{\epsilon}\right) = \Sigma\left(\tau, 0, g_{\phi}, g_{\epsilon}\right) - \Sigma\left(0, 0, g_{\phi}, g_{\epsilon}\right) \,. \tag{3.49}$$

Agora, escolhendo $b = \tau^{-\nu}$ em (3.48), além de h = 0, obtemos (estamos considerando que o ponto crítico é aproximado a partir do estado desordenado, de modo que $\tau > 0$):



Figura 3.15. Comportamento crítico das componentes par Σ^{even} e ímpar Σ^{odd} (em destaque) da condutividade (em unidades de Σ_0), apresentadas em função do comprimento linear L (em unidades do parâmetro de rede) da rede correlacionada com $g_{\phi} = g_{\epsilon} = 10^{-2}$. Enquanto a parte par escala com a densidade de energia ($\beta_{\sigma} \approx 1,007$), a parte ímpar escala com o parâmetro de ordem ($\beta_{\sigma} \approx 0,125$).

$$\Sigma(\tau, 0, g_{\phi}, g_{\epsilon}) = \Sigma\left(1, 0, g_{\phi}\tau^{\beta}, g_{\epsilon}\tau^{1-\alpha}\right) , \qquad (3.50)$$

donde resulta que:

$$\Sigma(0, 0, g_{\phi}, g_{\epsilon}) = \Sigma(1, 0, 0, 0) , \qquad (3.51)$$

Substituindo (3.50) e (3.51) em (3.49), ficamos com:

$$\Delta\Sigma\left(\tau, 0, g_{\phi}, g_{\epsilon}\right) = \Sigma\left(1, 0, g_{\phi}\tau^{\beta}, g_{\epsilon}\tau^{1-\alpha}\right) - \Sigma\left(1, 0, 0, 0\right).$$

$$(3.52)$$

Como as constantes de acoplamento são variáveis irrelevantes, além de pequenas, $g_{\phi}, g_{\epsilon} \ll 1$, podemos expandir o primeiro termo do lado direito da equação em série de Taylor, desde que não estejamos muito longe do ponto crítico. Assim, obtemos:

$$\Delta\Sigma\left(\tau, 0, g_{\phi}, g_{\epsilon}\right) = Ag_{\phi}\tau^{\beta} + Bg_{\epsilon}\tau^{1-\alpha}, \qquad (3.53)$$

em que $A \in B$ são constantes advindas da expansão em série de Taylor. Portanto, fica claro que, para $Ag_{\phi} \gg Bg_{\epsilon}$, temos $\beta_{\sigma} = \beta$, e o comportamento crítico da diferença de condutividade é governado pelo parâmetro de ordem. Já no limite oposto, em que $Ag_{\phi} \ll Bg_{\epsilon}$, ele é governado pela densidade de energia e $\beta_{\sigma} = 1 - \alpha$. Alternativamente, se tomarmos uma razão fixa tal que $Ag_{\phi} \ll Bg_{\epsilon}$, conforme o sistema se aproxima do ponto crítico e $\tau \to 0$, o primeiro termo acaba por suplantar o segundo a partir de alguma temperatura, já que $\beta < 1 - \alpha$. Isto explica o *crossover* observado na figura 3.14.

O mesmo tipo de raciocínio pode ser aplicado para os expoentes $\gamma_{\sigma} \in \delta_{\sigma}$. No regime dominado pelo parâmetro de ordem, obtemos $\gamma_{\sigma} = \gamma \in \delta_{\sigma} = \delta$, enquanto, no regime dominado pela densidade de energia, $\gamma_{\sigma} = \gamma + \beta - (1 - \alpha) \in \delta_{\sigma} = \beta \delta / (1 - \alpha)$. Estes resultados estão plenamente de acordo com a idéia de um novo "expoente anômalo" $\theta = (1 - \alpha)/\beta$.

Uma previsão interessante que podemos fazer usando a teoria de escala é sobre o comportamento crítico não da diferença de condutividade, mas do salto $\delta\Sigma$ que ocorre quando o sistema passa de uma fase para a outra cruzando a linha de coexistência de fases:

$$\delta\Sigma\left(\tau, 0, g_{\phi}, g_{\epsilon}\right) = \Sigma\left(\tau, 0^{+}, g_{\phi}, g_{\epsilon}\right) - \Sigma\left(\tau, 0^{-}, g_{\phi}, g_{\epsilon}\right) \,. \tag{3.54}$$

Da relação de escala (3.48), temos que, escolhendo $b = |\tau|^{-\nu}$:

$$\Sigma(\tau, h, g_{\phi}, g_{\epsilon}) = \Sigma\left(-1, h |\tau|^{-\beta\delta}, g_{\phi} |\tau|^{\beta}, g_{\epsilon} |\tau|^{1-\alpha}\right), \qquad (3.55)$$

em que tomamos $\tau < 0$ pois o salto de uma fase para a outra só pode ocorrer na fase ordenada. Como o limite $h \to 0^{\pm}$ é tomado antes do limite $\tau \to 0$, o argumento $h |\tau|^{-\beta\delta}$ é pequeno; assim, podemos expandir a condutividade acima em série de Taylor em relação ao argumento $g_{\phi} |\tau|^{\beta}$, já que as constantes de acoplamento são pequenas. Ficamos com:

$$\Sigma\left(-1,0^{\pm},g_{\phi}|\tau|^{\beta},g_{\epsilon}|\tau|^{1-\alpha}\right) = \Sigma\left(-1,0^{\pm},0,g_{\epsilon}|\tau|^{1-\alpha}\right) + f_{\pm}\left(g_{\epsilon}|\tau|^{1-\alpha}\right)g_{\phi}|\tau|^{\beta}, \quad (3.56)$$

em que f_{\pm} são funções de escala. Agora, observamos que a condutividade do sistema permanece a mesma se os spins forem invertidos ao mesmo tempo em que as condutividades microscópicas metálica e isolante forem trocadas, isto é:

$$\Sigma(\tau, h, g_{\phi}, g_{\epsilon}) = \Sigma(\tau, -h, -g_{\phi}, g_{\epsilon}) . \qquad (3.57)$$

Desta propriedade resulta que $\Sigma\left(-1, 0^+, 0, g_{\epsilon} |\tau|^{1-\alpha}\right) = \Sigma\left(-1, 0^-, 0, g_{\epsilon} |\tau|^{1-\alpha}\right)$ e $f_+(x) = -f_-(x)$. Logo, o salto na condutividade (3.54) pode ser escrito como:

$$\delta\Sigma\left(\tau, 0, g_{\phi}, g_{\epsilon}\right) = 2f_{+}\left(g_{\epsilon} \left|\tau\right|^{1-\alpha}\right)g_{\phi} \left|\tau\right|^{\beta} .$$

$$(3.58)$$

Expandindo a função de escala f_+ em série de Taylor, já que seu argumento é muito pequeno, obtemos:

$$\delta\Sigma(\tau, 0, g_{\phi}, g_{\epsilon}) = 2f_{+}(0) g_{\phi} |\tau|^{\beta} + 2f'_{+}(0) g_{\epsilon}g_{\phi} |\tau|^{\beta+1-\alpha} .$$
(3.59)

Logo, no regime dominado pelo parâmetro de ordem, o expoente do salto é igual a β , como no caso da diferença de condutividade. Entretanto, no regime dominado pela densidade de energia, o expoente vale $1 - \alpha + \beta$, em contraste com o caso da diferença de condutividade, onde o expoente assume o valor menor $1 - \alpha$.

Estamos agora em posição de revisitar os experimentos referentes ao sesquióxido de Vanádio

[73], de caráter tridimensional, e aos sais orgânicos [74], de caráter bidimensional. Os expoentes críticos da condutividade obtidos no caso do composto $(V_x Cr_{1-x})_2 O_3$, $\beta_\sigma \simeq 1/2, \gamma_\sigma \simeq 1$ e $\delta_{\sigma} \simeq 3$, concordam com os expoentes de campo médio de Ising, implicando que, neste composto, a constante de acoplamento com o parâmetro de ordem, g_{ϕ} , deve ser muito maior que o acoplamento com a densidade de energia, g_{ϵ} . Já no caso da família de sais $\kappa - ET$, pelos valores obtidos para os mesmos expoentes, $\beta_{\sigma} \simeq 1$, $\delta_{\sigma} \simeq 2$ e $\gamma_{\sigma} \simeq 1$, concluímos que a constante g_{ϵ} deve ser muito maior que g_{ϕ} , de modo que a criticalidade seja governada pelo comportamento singular da densidade de energia, e não da magnetização. Nos dois casos, o ponto crítico de Mott é descrito pela classe de universalidade de Ising, reconciliando os resultados dos trabalhos experimentais com as investigações teóricas anteriores [71, 72]. Fisicamente, enquanto o acoplamento g_{ϕ} está relacionado ao contraste entre as condutividades microscópicas das diferentes fases, o acoplamento g_{ϵ} está associado à contribuição do espalhamento dos elétrons pelas interfaces das regiões metálicas ou isolantes. É importante salientar que esta nossa abordagem não explica o motivo pelo qual as constantes de acoplamento assumem valores tão distintos nestas duas famílias de isolantes de Mott. Tal investigação requer uma modelagem de caráter mais microscópico, o que está além do escopo do presente trabalho, de cunho mais fenomenológico.

Uma indagação que surge após esta explicação é por que, nos sais 2D, o comportamento crítico é aquele esperado para essa dimensionalidade, enquanto nos compostos 3D é observado um comportamento de campo médio, significando que as flutuações do parâmetro de ordem não são relevantes na região do espaço de fases sondada experimentalmente. A questão fica ainda mais intrigante quando se nota que, em ambos os experimentos, os intervalos de temperatura usados para a obtenção dos expoentes críticos β_{σ} são, proporcionalmente, os mesmos. A resposta qualitativa pode estar no papel da desordem em cada situação.

Em ambos os casos, a desordem estrutural presente nos compostos pode ser mapeada num campo conjugado aleatório que se acopla ao parâmetro de ordem de Ising. Para ser mais específico, no caso dos orgânicos, a desordem tem origem no fato de um dos grupos de etileno da molécula orgânica ter duas possíveis orientações distintas [116]. Como pares de moléculas orgânicas formam os dímeros responsáveis por "doar" os portadores de carga, a orientação relativa das moléculas pode influenciar a ocupação de um determinado sítio do sistema de Hubbard, a qual, por sua vez, determina o sinal do pseudo-spin associado àquela região. Portanto, para comparar o papel da desordem nos compostos $2D \in 3D$, é necessário considerarmos não apenas um modelo de Ising limpo, mas sim um modelo anisotrópico de Ising com campo aleatório (RFIM, do inglês random-field Ising model):

$$H_{RFIM} = -J_{xy} \sum_{\{ij\}_{xy}} S_i S_j - J_z \sum_{\{kl\}_z} S_k S_l + \sum_i h_i S_i .$$
(3.60)

Este modelo, em particular, assume planos paralelos ao (x, y) correlacionados ao longo da direção \hat{z} segundo o parâmetro de troca anisotrópico J_z . Os sistemas $2D \in 3D$ discutidos anteriormente são descritos pelos limites $J_z \ll J_{xy} \in J_z \sim J_{xy}$, respectivamente. A intensidade relativa da desordem é medida pela variância Δ do campo aleatório h_i , cujo valor médio é nulo. De uma maneira geral, o RFIM permanece sob intensa investigação até os dias de hoje (para mais detalhes, ver [117]); para os nossos objetivos, contudo, basta o diagrama de fases da



Figura 3.16. Diagrama de fases do modelo de Ising com campo aleatório anisotrópico (3.60) no plano $\left(\frac{J_z}{J_{xy}}, \frac{J_{xy}}{\Delta}\right)$, em que J_z e J_{xy} denotam os parâmetros de troca anisotrópicos e Δ , a intensidade relativa da desordem. F refere-se à região ordenada (ferromagnética), enquanto P, à região desordenada (paramagnética). Adaptada de [118].

Hamiltoniana anisotrópica (3.60), obtido através de técnicas do Grupo de Renormalização em [118] e reproduzido na figura 3.16.

Para o caso tridimensional, a anisotropia $\frac{J_z}{J_{xy}}$ é uma variável irrelevante e, conforme se diminui a intensidade da desordem, há uma transição contínua entre uma fase desordenada e outra ordenada, governada pelo ponto fixo $\frac{J}{\Delta}|_c$ mostrado no gráfico. Assim, a região crítica é estreita e sua classe de universalidade pertence ao RFIM 3D; fora dela, o comportamento crítico pode ser descrito por uma teoria de campo médio do modelo ϕ^4 , que corresponde aos expoentes críticos de campo médio do modelo de Ising. Isto explica o porquê de se observar, no caso do $(V_x Cr_{1-x})_2 O_3$, os expoentes de campo médio, uma vez que a estreita região crítica só pode ser acessada para temperaturas reduzidas muito baixas. De fato, nas medidas realizadas em [73], os autores argumentam que, para alguns pontos experimentais correspondentes a temperaturas muito próximas da crítica, os expoentes seriam melhor ajustados por valores que desviam daqueles de campo médio e se aproximam dos correspondentes ao modelo de Ising em 3D.

Já no caso do RFIM anisotrópico em duas dimensões, a desordem, mesmo fraca, sempre desordena o sistema - d = 2 é a dimensão crítica inferior do modelo de Ising com campo aleatório. Apesar disso, para a situação de forte anisotropia $J_z \ll J_{xy}$ e fraca intensidade da desordem $\Delta \ll J_{xy}$, há uma larga região do diagrama de fases em que os planos estão efetivamente desacoplados um dos outros ($\xi_z < 1$), além de serem caracterizados por um comprimento de correlação interplanar alto ($\xi_{xy} \gg 1$). Portanto, para sistemas acessíveis experimentalmente, este regime equivale, na prática, a uma região crítica alargada governada pelo modelo de Ising bidimensional. Este alargamento da região crítica explica porque os expoentes obtidos em [74] correspondem aos valores de Ising 2D, já que, nos sais orgânicos, a anisotropia é alta e a desordem, fraca.

É interessante mencionar que toda esta explicação apresentada para os expoentes anômalos medidos nos sais orgânicos também pode ser usada para elucidar um outro experimento recente sobre estes compostos, no qual medidas de expansão térmica sugerem, segundo os autores, o valor de $0, 8 < \alpha_{\sigma} < 0,95$ para o expoente crítico do calor específico [119]. Este intervalo de

valores não só é muito alto para a classe de universalidade de Ising em duas dimensões, como também viola as relações de escala (1.16), quando combinado com os expoentes obtidos por Kagawa *et al.* O problema é que, para obter α_{σ} , os autores usam a chamada relação de escala de Grüneisen, que relaciona o expoente referente à expansão térmica do material $v^{-1} \frac{\partial v}{\partial T} \sim \tau^{-y}$ com o expoente do calor específico α_{σ} . Contudo, esta relação só vale para uma abordagem de campo médio. Nosso argumento é que a mudança no volume Δv deve ser proporcional ao parâmetro de ordem de Mott ϕ , de modo que $v^{-1} \frac{\partial v}{\partial T} \sim \tau^{\beta-1}$. Usando os valores dos expoentes críticos de Ising em duas dimensões, obtemos $-(\beta-1) = 0,875$, que está dentro do intervalo de valores encontrado pelos autores para o expoente y.

Portanto, a teoria perturbativa para o transporte em sistemas inomogêneos desenvolvida na seção anterior, com o auxílio de simulações numéricas, é capaz de explicar consistentemente os recentes resultados experimentais referentes a compostos que apresentam a transição térmica de Mott, indicando que, de fato, ela pertence à classe de universalidade de Ising. Uma previsão interessante que poderá ser testada em novos experimentos é sobre a comparação entre os expoentes críticos do salto na condutividade $\delta\Sigma$ ao longo da linha de coexistência (3.59) e os expoentes da diferença de condutividade $\Delta\Sigma$ (3.53), que seriam iguais no regime $g_{\phi} \gg g_{\epsilon}$, mas ligeiramente diferentes para $g_{\phi} \ll g_{\epsilon}$. Além disso, enquanto o expoente de $\Delta\Sigma$ para $g_{\phi} \ll g_{\epsilon}$ é sempre o mesmo tanto no regime crítico 2D quanto no regime de campo médio, já que $\alpha = 0$ para ambos, ele seria diferente no caso de $\delta\Sigma$, tanto para $g_{\phi} \ll g_{\epsilon}$ como para $g_{\phi} \gg g_{\epsilon}$, devido à presença do expoente β em ambas as situações.

3.5. Transporte em compostos dopados: fases esmética e nemática

Nesta seção, vamos analisar as propriedades de transporte da fase bidimensional de listras de carga da Hamiltoniana de Brazovskii (3.9), considerando que a condutividade local seja proporcional apenas ao parâmetro de ordem:

$$\sigma\left(\vec{x}\right) = \sigma_0\left[1 + g\phi\left(\vec{x}\right)\right]\,,\tag{3.61}$$

com o contraste entre as fases $g \ll 1$. Para fazer contato com os resultados experimentais referentes aos cupratos e aos niquelatos, apresentados na seção 3.1, vamos investigar duas situações distintas: na primeira, a fase de listras possui ordem de longo ou quase-longo alcance posicional e orientacional, sendo equivalente, portanto, à fase esmética encontrada nos cristais líquidos. Conforme explicado na seção 1.4, esta configuração só é possível, em 2D, na presença de um campo cristalino suficientemente forte, que impeça o derretimento da fase modulada.

No segundo caso que iremos estudar, não há campos cristalinos presentes, de modo que o derretimento da fase esmética não pode ser evitado. Assim, além dos modos de flutuação de densidade do parâmetro de ordem, consideraremos também o papel dos modos de flutuação elástica, que dão origem a uma fase que possui apenas ordem de (quase) longo alcance orientacional, e não mais posicional. Trata-se, conforme já discutido, de um estado equivalente à fase nemática observada nos cristais líquidos. Nosso objetivo, portanto, é esmiuçar o comportamento da condutividade destes dois tipos de fases através das fórmulas (3.29) e (3.30), principalmente na região próxima à transição para o estado completamente desordenado.

3.5.1. Fase esmética

Durante todo o resto desta seção, usaremos os resultados da solução de campo médio auto-consistente da Hamiltoniana de Brazovskii, apresentada na seção 1.3. Assim, a fase esmética surge como um estado metaestável do sistema a partir da espinodal $\tau_0^{(esp)} \approx -1, 89 (\Gamma u)^{2/3}$, em que $\tau_0 \propto \frac{T-T_c}{T_c}$, u é o parâmetro quártico da Hamiltoniana e $\Gamma = \frac{3}{2}q_0$. O parâmetro de ordem que descreve esta fase ordenada é dado por:

$$\langle \phi_{\vec{q}} \rangle = A \left(\delta_{\vec{q},\vec{q}_0} + \delta_{\vec{q},-\vec{q}_0} \right) \,, \tag{3.62}$$

com $A^2 = \frac{1}{3\xi^2 u}$. O comprimento de correlação do sistema ξ na fase esmética é obtido através da solução da equação auto-consistente (1.50), já que $\tau_A = \xi^{-2}$; no caso da fase desordenada, a equação que fornece o parâmetro de massa renormalizado τ e, conseqüentemente, determina ξ , é a (1.49). O comportamento do comprimento de correlação em função da temperatura foi apresentado na figura 1.12, onde o salto finito que caracteriza o caráter de primeira ordem da transição pode ser observado claramente. No que se segue, assumimos variações adiabáticas na temperatura do sistema, de modo que a transição ocorre quando a energia livre das fases desordenada e de listras se igualam, em $\tau_0^* \approx -2 (\Gamma u)^{2/3}$.

Consideramos que a configuração do parâmetro de ordem da fase esmética está congelada no referencial dos elétrons que difundem pelo sistema, de modo que devemos tomar a média quenched da condutividade (3.29). No caso de sistemas com transições de segunda ordem, vimos que o critério para se decidir qual dos dois tipos de média deve ser tomado era o valor do expoente dinâmico z. Contudo, no presente caso, como se trata de uma transição de primeira ordem, estabelecer tal critério é uma tarefa mais complexa, já que efeitos de nucleação devem ser levados em conta. Assim, consideramos que a dinâmica da nucleação de um estado metaestável sobre o outro seja muito mais lenta que a difusão eletrônica, de modo que o elétron seja capaz de sondar, de fato, uma fase de listras estáticas autêntica.

O primeiro termo da expansão perturbativa (3.29) se anula, pois $\phi_{\vec{q}=0} = 2A \int d^2x \cos(\vec{q_0} \cdot \vec{x}) =$ 0, refletindo a neutralidade elétrica do sistema. Logo, ao contrário do caso investigado anteriormente, referente aos isolantes de Mott não-dopados, as primeiras correções à homogeneidade da condutividade macroscópica são de ordem quadrática no contraste g e envolvem não apenas o valor médio do parâmetro de ordem, mas também seu espectro de flutuações. O termo de segunda ordem pode ser decomposto em uma parte isotrópica e outra anisotrópica; para isso, usamos a seguinte relação entre as funções de correlação conectada e não-conectada:

$$\langle \phi_{\vec{q}}\phi_{-\vec{q}}\rangle = \frac{1}{V}G_{\vec{q}} + \langle \phi_{\vec{q}}\rangle \langle \phi_{-\vec{q}}\rangle$$

$$\langle \phi_{\vec{q}}\phi_{-\vec{q}}\rangle = \frac{V^{-1}}{\xi^{-2} + (q-q_0)^2} + A^2 \left(\delta_{\vec{q},\vec{q}_0} + \delta_{\vec{q},-\vec{q}_0}\right) ,$$

$$(3.63)$$

em que estamos, mais uma vez, tomando o limite discreto das transformadas de Fourier, referente a condições de contorno periódicas (V é o volume do sistema). Logo, a condutividade total pode ser escrita como:

Capítulo 3. Isolantes de Mott Dopados

$$\Sigma_{av} = \sigma_0 \left(1 - \frac{g^2}{\tilde{\phi}_0^2} \Sigma_{\rm iso} - \frac{g^2}{\tilde{\phi}_0^2} \Sigma_{\rm aniso} \right) \,, \tag{3.64}$$

em que $\tilde{\phi}_0$ é o termo que normaliza a amplitude do parâmetro de ordem a 1, e Σ_{iso} , Σ_{aniso} denotam as partes isotrópica e anisotrópica da condutividade:

$$\Sigma_{\rm iso} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{\left(\hat{q} \cdot \hat{k}\right)^2}{\xi^{-2} + (k - q_0)^2}$$

$$\Sigma_{\rm aniso} = A^2 \sum_{\vec{k}} \left(\hat{q} \cdot \hat{k}\right)^2 \left(\delta_{\vec{k}, \vec{q}_0} + \delta_{\vec{k}, -\vec{q}_0}\right).$$
(3.65)

É interessante notar que, se tivéssemos tomado a média *annealed* ao invés da *quenched*, o termo isotrópico, proporcional ao espectro de flutuações do parâmetro de ordem, não apareceria. Apenas o termo anisotrópico, que sonda a amplitude do parâmetro de ordem - e, portanto, sua anisotropia espacial - influenciaria o comportamento da condutividade.

As somas acima podem ser realizadas diretamente; passando a primeira para o limite do contínuo e usando o fato de a função de correlação possuir um pico bastante pronunciado em q_0 , obtemos:

$$\Sigma_{\rm iso} = -\frac{(q_0\xi)}{4} \,. \tag{3.66}$$

Já a segunda soma fornece:

$$\Sigma_{\text{aniso}} = \begin{cases} 0 , \text{ para } \tau_0 > \tau_0^* \\ \frac{2}{3u\xi^2} \left(\hat{q} \cdot \hat{q}_0 \right)^2 , \text{ para } \tau_0 \le \tau_0^* , \end{cases}$$
(3.67)

uma vez que o valor médio do parâmetro de ordem se anula na fase desordenada. O termo quártico u pode ser escrito em função do comprimento de correlação da fase ordenada na temperatura de transição (ξ^*), notando que $\rho_A(\rho_0^*) \approx 1$:

$$(\xi^*)^{-2} = \tau_A = (\Gamma u)^{2/3} \quad \Rightarrow \quad u = \frac{2(\xi^*)^{-2}}{3(q_0\xi^*)}.$$
 (3.68)

Portanto, até segunda ordem em teoria de perturbação, podemos escrever a condutividade total do sistema na fase desordenada como:

$$\Sigma_{av}^{\rm des} = \sigma_0 \left\{ 1 - \frac{g^2}{4\tilde{\phi}_0^2} \left(q_0 \xi \right) \right\} \,, \tag{3.69}$$

enquanto, para a fase esmética, temos:

$$\Sigma_{av}^{\text{esm}} = \sigma_0 \left\{ 1 - \frac{g^2}{4\tilde{\phi}_0^2} \left(q_0 \xi \right) \left[1 + 4 \left(\frac{\xi^*}{\xi} \right)^3 \cos^2 \theta \right] \right\} , \qquad (3.70)$$

em que θ é o ângulo entre a direção da corrente externa aplicada ao sistema e a direção de



Figura 3.17. Condutividade Σ medida perpendicularmente à direção de propagação das listras ($\theta = 0$, linha sólida), em função da temperatura reduzida τ_0 (em unidades do módulo da temperatura de transição $|\tau_0^*|$). Foi considerado um leve comportamento isolante intrínseco à condutividade média do sistema σ_0 , representada pela linha pontilhada do gráfico.

modulação das listras \hat{q}_0 . Vemos, portanto, que a condutividade medida na direção em que as listras se alongam ($\theta = \pi/2$), a qual denotamos por Σ_{av}^{\parallel} , é sempre maior que a condutividade medida ao longo do eixo ortogonal às listras ($\theta = 0$), que denotamos por Σ_{av}^{\perp} . Além disso, a anisotropia $\Sigma_{av}^{\parallel} - \Sigma_{av}^{\perp} \propto \xi^{-2}$ cresce conforme a temperatura diminui, já que o comprimento de correlação aumenta. Qualitativamente, esta propriedade está de acordo com os resultados observados por Ando *et al.* [85] para as anisotropias da resistividade das fases de listras dos cupratos LSCO e YBCO, apresentadas anteriormente na figura 3.6. Contudo, para podermos fazer uma comparação mais precisa e verificar se a taxa de crescimento está realmente de acordo com a previsão do modelo atual, ou mais próxima de um modelo em que a ordem do estado modulado é nemática, precisaríamos de uma teoria microscópica que fornecesse o comportamento dos parâmetros efetivos σ_0 , $g \in q_0$. Porém, isto está além do escopo deste trabalho, no qual focamos em propriedades físicas mais gerais e qualitativas.

Prosseguindo com a análise das condutividades (3.69) e (3.70), notamos que a existência do salto no comprimento de correlação ξ implica na ocorrência de um salto na condutividade durante a transição da fase desordenada para a fase esmética, que denominamos de $\Delta \Sigma = \Sigma_{av}^{\text{des}} (\tau_0^*) - \Sigma_{av}^{\text{esm}} (\tau_0^*)$. Este salto está ilustrado na figura 3.17, na qual apresentamos o comportamento da condutividade do sistema, medida na direção perpendicular às listras ($\theta = 0$), em função da temperatura reduzida.

É de extrema importância notar que não só o módulo do salto depende da direção na qual a condutividade é medida, mas também o seu sinal. Na figura 3.18, mostramos a dependência do salto $\Delta\Sigma$ com o ângulo θ : vemos claramente que, enquanto o sinal é positivo para o caso de uma corrente externa aplicada perpendicularmente às listras ($\theta = 0$), ele é negativo quando a corrente passa paralelamente a elas ($\theta = \pi/2$). O sinal positivo é esperado, uma vez que ele se origina do termo da condutividade que sonda o parâmetro de ordem do sistema; já o sinal negativo, não. Para compreender isso, consideremos o *toy model* constituído por uma rede de resistores composta por listras unidimensionais com condutividades distintas. Trata-se de um conjunto periódico de *s* listras, sendo que cada uma possui N_s resistores ao longo do eixo horizontal e N ao longo do eixo vertical, tal que $2sN_s = N$, conforme ilustra a figura



Figura 3.18. Salto na condutividade durante a transição de fases, $\Delta \Sigma = \Sigma_{av}^{des} (\tau_0^*) - \Sigma_{av}^{esm} (\tau_0^*)$, em função do ângulo θ (em graus) entre a direção de modulação das listras, \hat{q}_0 , e a direção tomada para se medir a condutividade do sistema.



Figura 3.19. Toy model de uma rede de s listras verticais alternadas formadas por resistores de condutividades σ_M e $\sigma_I < \sigma_M$. Cada listra é constituída de N_s repetições, ao longo da direção horizontal, de um conjunto de N resistores ao longo da direção vertical, de modo que $2sN_s = N$. Na figura à esquerda (direita), é apresentado o caso em que a corrente externa é paralela (perpendicular) às listras.

3.19. As listras se alternam entre "metálicas" e "isolantes", sendo que, no primeiro caso, os resistores têm condutividade σ_M , enquanto, no segundo caso, a condutividade vale $\sigma_I < \sigma_M$. A condutividade equivalente deste sistema pode ser calculada diretamente: quando a corrente aplicada é paralela às listras, obtemos $\Sigma_{toy}^{\parallel} = \sigma_0$; já quando a corrente flui perpendicularmente às listras, temos $\Sigma_{toy}^{\perp} = \sigma_0 (1 - g^2)$, em que definimos a condutividade média $\sigma_0 = \frac{\sigma_M + \sigma_I}{2}$ e o contraste $g = \frac{\sigma_M - \sigma_I}{\sigma_M + \sigma_I}$. A situação correspondente ao estado desordenado equivale à rede em que a condutividade de todos os resistores é igual ao valor médio σ_0 , implicando em $\Sigma_{toy}^{\text{des}} = \sigma_0$.

Assim, para este toy model, notamos a existência de um salto $\Delta\Sigma$ positivo no caso em que a condutividade é medida na direção perpendicular às listras. Já no caso em que ela é tomada paralelamente às faixas condutoras unidimensionais, o salto se anula. Conforme adiantamos anteriormente, o sinal positivo de $\Delta\Sigma$ não é particular do modelo de Brazovskii, pois aparece até mesmo neste simples toy model, em que não há correlações entre os resistores microscópicos. Ele reflete, em última instância, o fato de os elétrons que se difundem ortogonalmente às listras sondarem o parâmetro de ordem do sistema e, conseqüentemente, sua anisotropia espacial. Já no que concerne o salto negativo, que aparece quando os elétrons se difundem ao longo das listras, ele surge como uma característica particular do modelo de Brazovskii. Analisando sua origem, vemos que ele está relacionado ao termo Σ_{iso} da expansão perturbativa da condutividade, que é proporcional à função de correlação conectada da Hamiltoniana de Brazovskii. Desse modo, podemos dizer que o sinal negativo é uma manifestação particular do espectro de flutuações do modelo usado.

O comportamento qualitativo da condutividade da fase esmética delineado nos parágrafos anteriores pode ser comparado com as medidas de resistividade envolvendo os niquelatos, nos quais acredita-se que a fase de listras possui um caráter estático, devido ao seu forte acoplamento com a rede [82, 83, 84]. Os dois gráficos superiores da figura 3.5 indicam a ocorrência de um aumento súbito na resistividade do composto LSNO medida ao longo da direção perpendicular às listras, quando, ao ser submetido a uma redução de temperatura, ele sofre a transição para a fase de listras ordenadas [82, 83]. Este aumento pode ser atribuído a uma suavização do salto abrupto $\Delta \Sigma > 0$ descrito anteriormente, devido à presença de desordem estrutural [65]. Seria bastante interessante obter medidas experimentais da condutividade que permitam comparar este salto com o comportamento da resistividade durante a transição de fases no caso em que a corrente é aplicada paralelamente às listras. Assim, haveria mais elementos para verificar se o modelo de Brazovskii é realmente apropriado para descrever as excitações de carga da fase de listras dos niquelatos.

Na parte inferior da mesma figura 3.5, extraída de [84], observa-se a ocorrência de vários saltos menos intensos na resistividade do composto LNO, para temperaturas abaixo daquela na qual a fase de listras ordenadas é estabelecida. Novamente, a corrente externa é aplicada perpendicularmente às listras. Segundo os autores de [84], este comportamento pode ser atribuído às mudanças no módulo do vetor de onda das listras, q_0 , que diminui à medida que a temperatura abaixa, de acordo com os dados de difração de nêutrons obtidos em um outro trabalho, [120]. O modelo que desenvolvemos nesta seção é capaz de relacionar consistentemente a diminuição de q_0 com o aumento da resistividade. Para isso, consideremos uma fase esmética com vetor de onda $q'_0 = \eta q_0$, com $\eta < 1$; de acordo com (3.70), sua condutividade é dada por:

$$(\Sigma_{av}^{\text{esm}})_{q'_0} = \sigma_0 \left\{ 1 - \frac{g^2}{4\tilde{\phi}_0^2} \left(q_0 \xi' \right) \left[1 + 4 \left(\frac{\xi^*}{\xi'} \right)^3 \cos^2 \theta \right] \right\} , \qquad (3.71)$$

em que ξ' , o novo comprimento de correlação, é solução da equação auto-consistente:

$$-\rho_A' = \rho_0 + \frac{\eta}{\sqrt{\rho_A'}}, \qquad (3.72)$$

com $(\xi')^{-2} = \rho'_A (\Gamma u)^{2/3}$. Para pequenos valores de $1 - \eta$ e para qualquer temperatura abaixo da de transição, a mudança no vetor de onda de q_0 para $\eta q_0 = q'_0$ é acompanhada de uma diminuição na condutividade medida perpendicularmente às faixas $\Sigma_{av}^{\perp}(q'_0) < \Sigma_{av}^{\perp}(q_0)$, como ilustra a figura 3.20, em acordo com os saltos na resistividade observados nos niquelatos.

Resumindo, as principais manifestações da termodinâmica do parâmetro de ordem da fase esmética no comportamento da condutividade são: a anisotropia $\Sigma_{av}^{\parallel} - \Sigma_{av}^{\perp} \propto \xi^{-2}$ monotonicamente decrescente com a temperatura; a existência de um salto na condutividade $\Delta \Sigma =$ $\Sigma_{av}^{\text{des}}(\tau_0^*) - \Sigma_{av}^{\text{esm}}(\tau_0^*)$, concomitante à transição entre o estado ordenado e o desordenado; a dependência do sinal deste salto com o ângulo entre a direção tomada para medir a condutividade e a direção de modulação das listras. De todas estas propriedades, a última é específica do modelo de Brazovskii ou, mais precisamente, do espectro das suas excitações de mais baixa



Figura 3.20. Comportamento do salto da condutividade $\Delta \Sigma = \Sigma' - \Sigma$ entre a fase esmética com vetor de onda de módulo $q'_0 = \eta q_0$ e a fase com vetor de onda q_0 , para $\eta = 0, 9$. No gráfico à esquerda, o salto é apresentado em função do ângulo θ (em graus) entre a corrente externa e a direção de modulação das listras, para uma temperatura fixa abaixo da de transição. No gráfico à direita, mostra-se o salto em função da temperatura reduzida τ_0 (em unidades do módulo da temperatura de transição $|\tau_0^*|$), para o caso em que $\theta = 0^\circ$.

energia. Conforme argumentamos, este modelo tem boa concordância qualitativa com os dados referentes às fases de listras estáticas observadas nos niquelatos. No que diz respeito aos cupratos, de acordo com o que já discutimos na seção 3.1, as listras observadas aparentam ser mais flexíveis e flutuantes, indicando a presença de uma ordem nemática, ao invés da esmética [28, 86, 87, 88]. Assim, na seqüência, vamos aplicar o mesmo formalismo para investigar as características da condutividade de uma fase nemática.

3.5.2. Fase nemática

A existência de uma fase nemática nos isolantes de Mott dopados foi proposta inicialmente por Kivelson *et al.* - que a denominaram de fase eletrônica líquido-cristalina - como conseqüência das flutuações quânticas das paredes das listras da fase esmética [28]. Posteriormente, o conceito de um ordenamento nemático eletrônico foi estendido para outros tipos de sistemas metálicos, como o gás de elétrons a baixíssimas temperaturas na presença de campos magnéticos externos [89, 90]. A essas idéias, sucederam-se vários resultados experimentais corroborando-as (no caso dos cupratos, ver, por exemplo, os já mencionados trabalhos [86, 87, 88]).

Em [17], Carlson *et al.* desenvolveram uma interessante modelagem teórica para as propriedades de transporte dessas fases eletrônicas nemáticas, a fim de explicar medidas de ruído da resistividade em alguns cupratos. A idéia básica é associar cada célula nemática coerente do sistema, como aquelas apresentadas na figura 1.17, a um pseudo-spin, de modo que $S_i = 1$ equivale a uma célula cujo diretor nemático é paralelo ao eixo vertical, enquanto $S_i = -1$ refere-se a uma célula cujo diretor é paralelo ao eixo horizontal. Um campo conjugado externo h privilegia uma das duas direções, enquanto um campo aleatório h_i acoplado aos pseudo-spins representa o papel da desordem. Portanto, o problema é mapeado em um modelo de Ising com campo aleatório (RFIM). Através de simulações numéricas que levam em conta as flutuações quânticas dos pseudo-spins, os autores puderam chegar a um padrão de ruídos condizente com aqueles observados experimentalmente. Além disso, observaram, numericamente, uma relação linear entre a anisotropia da resistividade R_a e o parâmetro de ordem nemático m do sistema a

3.5. Transporte em compostos dopados: fases esmética e nemática

T=0e na presença de um campo externo hvariável. Definindo a quantidade $r=\frac{R_{\perp}(m\rightarrow 1)}{R_{\parallel}(m\rightarrow 1)}$, o resultado obtido foi:

$$R_a \equiv \left(\frac{r+1}{r-1}\right) \left(\frac{R_{\perp} - R_{\parallel}}{R_{\perp} + R_{\parallel}}\right) = m.$$
(3.73)

Nosso objetivo, nesta sub-seção, é desenvolver uma teoria microscópica perturbativa para a condutividade da fase nemática, levando em conta não os modos de flutuações quânticas, mas os modos de flutuações elásticas. Eles foram apresentados na seção 1.4, e são descritos pela Hamiltoniana (1.58), que reescrevemos aqui por clareza:

$$\mathcal{H}_{fon}[u] = \frac{1}{2}B \int d^2x \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \lambda^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)^2 \right], \qquad (3.74)$$

com:

$$B = \phi_0^2 q_0^2$$
 e $\lambda^2 = \frac{1}{4q_0^2}$, (3.75)

em que ϕ_0 denota a amplitude do parâmetro de ordem⁵. Assim como as excitações quânticas, os modos tipo fônon também induzem o derretimento da fase esmética, dando origem à fase nemática, em que há apenas ordem de (quase) longo alcance orientacional. Este estado é caracterizado pela presença de células coerentes cujo comprimento característico ξ_D depende da densidade n_D de discordâncias livres presentes no sistema, $\xi_D = n_D^{-1/2} = d \exp\left(\frac{E_D}{2k_BT}\right)$, em que *d* refere-se à largura típica das listras, $d = \frac{2\pi}{q_0}$, e E_D é a energia de uma discordância livre. Dentro de cada célula, a ordem esmética é descorrelacionada apenas pelas flutuações elásticas não-singulares, e o diretor corresponde à média das orientações das listras englobadas. Para fins de clareza, reproduzimos novamente na figura 3.21 a representação da fase nemática como um conjunto de células coerentes, que fora apresentada anteriormente na figura 1.17.

A abordagem que adotamos para lidar com o problema consiste em tomar estas células finitas como os resistores microscópicos do sistema nemático. Assim, após calcularmos a condutividade σ_b associada a cada célula, podemos usar as fórmulas (3.29) e (3.30) para obter a condutividade macroscópica do sistema, já que, para escalas de comprimento maiores que ξ_D , ele apresenta ordenamento nemático. Vale salientar que este procedimento não é válido para temperaturas muito baixas, nas quais o tamanho de cada célula é muito grande e o fator de Debye-Waller praticamente diverge.

Dentro de cada célula, apesar de as flutuações de densidade do parâmetro de ordem permanecerem pequenas desde que $\tau_0 < \tau_0^*$, as flutuações elásticas são relevantes a qualquer temperatura, devido ao caráter bidimensional do sistema. Enquanto um elétron leva um tempo típico $t_{el} \sim D\xi_D^2$ para atravessar a célula, os modos tipo fônon se propagam em uma escala de tempo $t_{fon} \sim v\xi_D$, em que v é a velocidade do som no material. Assim, $t_{el} \gg t_{fon}$, significando que os elétrons sondam todo o espaço de configurações. Portanto, a condutividade média de cada célula σ_b deve ser calculada tomando-se a expressão annealed (3.30). Na aproximação em

119

⁵ Não estamos usando a letra A pois reservamos esta notação exclusivamente para a amplitude do parâmetro de ordem fornecida pela solução auto-consistente. A princípio, a amplitude ϕ_0 poderia ser obtida por qualquer outro método.



Figura 3.21. Representação da fase nemática resultante da atuação de flutuações elásticas e discordâncias livres na fase de listras bidimensional, caracterizada pela presença de células de tamanho típico ξ_D descorrelacionadas apenas por modos fonônicos. Adaptada de [11].

que os modos de densidade estão desacoplados dos modos elásticos, de acordo com o que foi discutido na seção 1.4, podemos escrever o valor médio do parâmetro de ordem do sistema como:

$$\bar{\phi}_{\vec{q}} = e^{-W} A \left(\delta_{\vec{q},\vec{q}_0} + \delta_{\vec{q},-\vec{q}_0} \right) \,, \tag{3.76}$$

em que W é o fator de Debye-Waller calculado dentro das células. Como elas possuem dimensões finitas, W não diverge; usando os resultados de Toner e Nelson [11], e considerando $\hat{q}_0 = q_0 \hat{x}$, estas dimensões são dadas por:

$$\xi_x = \lambda^{-1/3} n_D^{-2/3} = d (4\pi)^{1/3} \exp\left(\frac{2E_D}{3k_B T}\right)$$

$$\xi_y = \lambda^{1/3} n_D^{-1/3} = d (4\pi)^{-1/3} \exp\left(\frac{E_D}{3k_B T}\right), \qquad (3.77)$$

de modo que $\xi_D = \sqrt{\xi_x \xi_y}$. Assim, podemos calcular o fator de Debye-Waller através da expressão (1.64), observando que, agora, o espaço de Fourier está limitado não só pelo usual *cutoff* ultravioleta a^{-1} , em que a é o parâmetro de rede, mas também pelos *cutoffs* infravermelhos ξ_x^{-1} e ξ_y^{-1} . Notando que $\xi_y/\xi_x \sim \exp\left(-\frac{E_D}{3k_BT}\right) < 1$, conforme está representado na figura 3.21, e usando que $\xi_y \gg a$, obtemos:

$$W = \frac{q_0^2}{2\pi^2 B} \int_{\xi_y^{-1}}^{\Lambda} dq_y \int_{\xi_x^{-1}}^{\Lambda} \frac{dq_x}{q_x^2 + \lambda^2 q_y^4}$$
$$W = \frac{q_0^2}{4\pi B\lambda} \xi_y = \frac{e^{\frac{E_D}{3k_B T}}}{2^{\frac{2}{3}} \pi^{\frac{1}{3}} \phi_0^2}.$$
(3.78)

3.5. Transporte em compostos dopados: fases esmética e nemática

Fica evidente que, para temperaturas muito baixas, o fator de Debye-Waller cresce rapidamente, tornando o valor médio do parâmetro de ordem (3.76) praticamente nulo. Tomando a média *annealed* (3.30) da condutividade de uma célula nemática, cujo parâmetro de ordem é dado por (3.76), obtemos, até ordem quadrática na teoria de perturbação:

$$\sigma_b = \sigma_0 \left(1 - \frac{2g^2 A^2}{\tilde{\phi}_0^2} e^{-2W} \cos^2 \theta \right) \,, \tag{3.79}$$

em que usamos a desigualdade $\xi_D^{-1} < q_0 < a^{-1}$ para realizar a soma. Assim, notamos que, apesar de as flutuações elásticas destruírem a ordem posicional das listras dentro de uma célula nemática, elas preservam a ordem orientacional, conforme era esperado. Adotando a convenção de que o diretor nemático é paralelo à direção de modulação das listras \hat{q}_0 [11], podemos reconhecer em θ o ângulo entre a corrente externa aplicada para se medir a condutividade e o diretor nemático da célula.

A partir de agora, vamos nos concentrar em dois casos específicos, referentes às situações em que a condutividade é medida paralela ou perpendicularmente ao diretor ($\theta = 0$ ou $\theta = \pi/2$), correspondendo às direções perpendicular e paralela às listras, respectivamente. Como o sistema se comporta como um cristal líquido nemático para escalas de comprimento maiores que ξ_D , o diretor de cada célula vai sofrer flutuações em torno da posição de equilíbrio devido às interações com as outras células. Assim, escrevemos $\theta = \theta_0 + \alpha$, em que α denota as flutuações do diretor nemático e obedece à Hamiltoniana:

$$H_{nem} = \frac{1}{2} K \int d^2 x \left| \vec{\nabla} \alpha \right|^2 \,, \tag{3.80}$$

conforme explicado na seção 1.4. Logo, para os dois casos de interesse, $\theta_0 = 0$ e $\theta_0 = \pi/2$, podemos escrever a condutividade de uma única célula como:

$$\sigma_{b} = \sigma_{0} \left(1 - \frac{g^{2} A^{2}}{\tilde{\phi}_{0}^{2}} e^{-2W} \pm \frac{g^{2} A^{2}}{\tilde{\phi}_{0}^{2}} e^{-2W} \cos 2\alpha \right)
\sigma_{b} = \tilde{\sigma}_{0} \left(1 \pm \tilde{g} \cos 2\alpha \right) ,$$
(3.81)

em que o sinal mais (menos) refere-se à condutividade medida paralelamente (perpendicularmente) às listras. Na expressão anterior, introduzimos a condutividade média "renormalizada" $\tilde{\sigma}_0 = \sigma_0 \left(1 - g^2 A^2 e^{-2W} / \tilde{\phi}_0^2\right)$ e o contraste "renormalizado" $\tilde{g} = g^2 A^2 e^{-2W} / \tilde{\phi}_0^2$. Como nas escalas de comprimento consideradas ($L > \xi_D$) o sistema possui caráter nemático, podemos tomar σ_b como a condutividade "microscópica" da fase nemática e aplicar novamente o formalismo perturbativo da seção 3.3. Podemos, ainda, considerar a dinâmica das flutuações do diretor nemático muito mais lenta que a escala de tempo típica da difusão eletrônica, e tomar a média quenched da condutividade global do sistema, obtendo:

$$\Sigma_{av}^{\text{nem}} = \tilde{\sigma}_0 \left(1 \pm \tilde{g} \left\langle \cos 2\alpha \right\rangle \right) \,, \tag{3.82}$$

até a ordem dominante na teoria de perturbação. Do resultado acima, seguem-se várias propriedades interessantes. Primeiramente, é interessante notar que o parâmetro de ordem nemático $\langle \cos 2\alpha \rangle$ surge naturalmente neste modelo, como conseqüência da aplicação do formalismo perturbativo para se calcular a condutividade individual de cada célula nemática. Além disso, ao contrário do caso da fase esmética, não é prevista a ocorrência de nenhuma descontinuidade na condutividade, já que a transição para o estado desordenado (líquido) é do tipo Kosterlitz-Thouless, induzida pelo desligamento dos pares ligados de disclinações.

Outro aspecto importante diz respeito à anisotropia da condutividade, dada por:

$$\Sigma_{av}^{\parallel} - \Sigma_{av}^{\perp} = 2\tilde{\sigma}_0 \tilde{g} \left\langle \cos 2\alpha \right\rangle \,, \tag{3.83}$$

em que Σ_{av}^{\parallel} (Σ_{av}^{\perp}) refere-se à condutividade medida paralelamente (perpendicularmente) às listras. Comparada à anisotropia da condutividade da fase esmética, que também é proporcional a $g^2 A^2$ (assim como \tilde{g}), esperamos que a anisotropia referente à fase nemática seja menor, devido à presença do fator de Debye-Waller e^{-2W} . Estas observações poderiam auxiliar na análise de dados da resistividade dos cupratos, como aqueles de Ando *et al.* [85] (ver figura 3.6), para corroborar a hipótese da existência de uma fase com ordem nemática, ao invés de esmética.

Para comparar a equação (3.83) com o resultado (3.73), obtido por Carlson *et al.* em [17], definimos a resistividade da fase nemática como o inverso da condutividade, $R_{av}^{\text{nem}} = \tilde{\rho}_0 (1 \mp \tilde{g} \langle \cos 2\alpha \rangle)$, em que $\tilde{\rho}_0 = 1/\tilde{\sigma}_0$. Assim, fica claro que:

$$\left(\frac{R_{av}^{\parallel} - R_{av}^{\perp}}{R_{av}^{\parallel} + R_{av}^{\perp}}\right) = \tilde{g} \left< \cos 2\alpha \right> .$$
(3.84)

O fator r definido por Carlson et al. é dado, no contexto presente, por:

$$r = \frac{\tilde{\rho}_0 \left(1 + \tilde{g}\right)}{\tilde{\rho}_0 \left(1 - \tilde{g}\right)} \quad \Rightarrow \quad \tilde{g} = \frac{r - 1}{r + 1}.$$
(3.85)

Combinando a equação (3.85) com a (3.84), obtemos exatamente a mesma expressão (3.73) observada em [17]. É notável o fato de duas abordagens completamente distintas ao problema fornecerem uma relação idêntica entre a anisotropia da condutividade e o parâmetro de ordem termodinâmico, já que uma considera os efeitos das flutuações quânticas, enquanto a outra aborda os efeitos das flutuações clássicas. Provavelmente, este resultado comum deve-se ao fato de a fase nemática ser constituída, em ambos os casos, por aglomerados individualizados com ordem esmética de curto alcance. Tal relação pode ser de extrema valia na comparação entre as propriedades de transporte e as propriedades de ordenamento das listras nos cupratos. De fato, em um experimento bastante recente envolvendo o composto YBCO, foi observada uma coincidência significativa entre o comportamento do peso espectral das excitações anisotrópicas de spin de mais baixa energia e o comportamento da anisotropia da resistividade em função da temperatura [88].

Por fim, é importante notar que a presente modelagem abre caminho para a investigação das propriedades de transporte da fase nemática fora do equilíbrio. As flutuações elásticas dentro de uma célula nemática são sempre relevantes e bastante intensas, mesmo que ela seja limitada espacialmente, pois as células são estruturas bidimensionais. Os desvios no parâmetro de ordem por causa dessas excitações podem ser estimado por $|\delta \phi| = \sqrt{e^{2W} - 1} \langle \phi \rangle$; assim, mesmo para o regime de temperaturas de validade do nosso modelo, em que o fator de Debye-Waller assume valores moderados, de modo a preservar a ordem orientacional das células, os desvios podem assumir valores da mesma ordem de grandeza do próprio valor médio do parâmetro de ordem. Esses efeitos gerariam flutuações no valor médio da condutividade global do sistema, gerando termos de ordem g^2 na teoria de perturbação. Assim, é esperado que estas flutuações

manifestem-se, por exemplo, como ruídos em medidas de séries temporais da resistividade do sistema [17]. Para se avançar nesta análise, contudo, seria necessária uma teoria microscópica dinâmica que está além do escopo da presente investigação.

Capítulo 4

Conclusões

Nesta tese, investigamos as propriedades magnéticas e de transporte das fases inomogêneas moduladas que surgem em sistemas com interações competitivas, usando o modelo de Brazovskii para descrever a sua termodinâmica. No que se segue, vamos dividir as conclusões em duas partes, referentes aos resultado obtidos nos capítulos 2 e 3.

No que se refere aos ferromagnetos dipolares com dimensões finitas, mostramos que a geometria limitada do sistema, aliada às condições de contorno de Dirichlet empregadas, acabam por discretizar o espaço de momentos. Contudo, esta diminuição no espaço disponível para a atuação das flutuações do parâmetro de ordem não é capaz de impedir que elas induzam uma transição de primeira ordem entre a fase desordenada e a fase modulada, a exemplo do que ocorre com o bloco infinito, estudado por Garel e Doniach [6]. Observamos ainda que esta transição pode ser induzida não apenas por mudanças na temperatura, mas também por alterações na largura do bloco. Em relação às configurações associadas às várias combinações dos vetores de onda da modulação, obtivemos que, em geral, a fase de modulação mais simples possível - a fase de listras - é a mais estável, repetindo, mais uma vez, o resultado do caso do bloco infinito. Entretanto, para o bloco finito, a limitação espacial no eixo \hat{x} , correspondente à largura do bloco, quebra a simetria por translações ao longo desta direção, fazendo com que estados com diferentes modulações em \hat{x} tenham diferentes energias livres. Em particular, observamos que, quanto menor a modulação, menor a energia da configuração; além disso, quando houver a possibilidade de o sistema formar uma fase de listras cujo período seja comensurável à largura do bloco, esta fase será a mais estável.

Aplicando o formalismo geral da Hamiltoniana de Ginzburg-Landau de um bloco ferromagnético dipolar finito ao caso dos terraços formados pela fase α nos filmes finos de MnAs:GaAs, fomos capazes de explicar consistentemente as estruturas de domínio observadas por meio das imagens de MFM em [13] e [52]. Considerando spins com simetria Ising, procedimento válido principalmente no intervalo de altas temperaturas da região de coexistência, obtivemos que a configuração de menor energia corresponde às estruturas tipo II apresentadas na figura 2.5, com 5, 4, 3 e 2 domínios ao longo da direção limitada do terraço. Considerando, posteriormente, spins vetoriais planares (modelo XZ), chegamos também ao resultado que a componente da magnetização ao longo da direção limitada não se divide em domínios, em acordo com as estruturas tipo I mostradas na mesma figura. Tendo determinado as configurações que minimizam a Hamiltoniana de Ginzburg-Landau, desenvolvemos um modelo fenomenológico para a magnetização que levasse em conta a contribuição de múltiplos componentes de Fourier, além da aproximação senoidal empregada anteriormente. Neste modelo, a reorientação da magnetização da direção paralela para a direção perpendicular ao plano do filme de MnAs:GaAs se dá para a razão de aspecto $p \equiv d/D \approx 1, 5$. A nosso ver, o maior mérito desta modelagem é que, aliada ao método de Stoner-Wohlfarth, ela é capaz de prever a mudança na forma das curvas de histerese observada através de medidas de espalhamento de raios X, fornecendo o valor $p \approx 1, 8$, que não está distante da razão de aspecto obtida experimentalmente, $p_{exp} \approx 2, 9$ [13].

Assim, de um modo geral, podemos dizer que o modelo de Brazovskii, munido das generalizações e das extensões apropriadas, descreve com bastante clareza as propriedades magnéticas dos filmes finos de MnAs:GaAs. Para avançar no entendimento delas, seria interessante levar em conta a interação dipolar entre os terraços, que deve reduzir ainda mais o número de domínios das configurações possíveis de serem observadas. Além disso, o estudo minucioso do modelo dipolar XZ para o caso de um sistema finito usando o Grupo de Renormalização (como feito em [62] para um sistema infinito), apesar de aparentar ser uma tarefa bastante complexa, poderia esclarecer definitivamente qual é o efeito da inclusão dos defeitos topológicos no diagrama de fases. Por fim, para se obter uma descrição mais precisa das curvas de histerese, seria de extrema valia a realização de simulações numéricas que envolvessem configurações com paredes de domínio também ao longo da direção ilimitada e que fossem capazes de levar em conta a contribuição da nucleação e dos centros de *pinning* para a reorientação magnética.

No que concerne as propriedades de transporte dos isolantes de Mott, demonstramos, de maneira geral, que a condutividade macroscópica não é necessariamente proporcional ao valor médio do parâmetro de ordem do sistema inomogêneo. Isto acontece mesmo com a existência do acoplamento linear entre a condutividade microscópica e o parâmetro de ordem gerado pelo contraste entre as condutividades das diferentes fases. No caso dos isolantes de Mott não-dopados ao longo da linha de coexistência do diagrama de fases (P,T), cuja termodinâmica deve ser descrita por um parâmetro de ordem do tipo Ising [71, 72], a contribuição do espalhamento dos elétrons pelas interfaces das regiões isolantes e metálicas dá origem a um outro acoplamento, desta vez entre a condutividade microscópica e a densidade de energia. Através da solução perturbativa do problema de uma rede de resistores correlacionados, e com o auxílio de simulações numéricas realizadas por colaboradores, mostramos que, dependendo da razão entre as duas constantes de acoplamento da condutividade microscópica, a condutividade macroscópica apresenta um comportamento de *crossover* próximo ao ponto crítico, passando de uma região cuja criticalidade é determinada pela densidade de energia, para uma outra que é governada pela magnetização. Considerando tais resultados, juntamente com o papel da desordem estrutural, argumentamos que os expoentes críticos da condutividade obtidos nos experimentos envolvendo a transição de Mott em 3D [73] e em 2D [74] podem ser explicados considerando que o ponto crítico pertence à classe de universalidade de Ising, reconciliando-os com os trabalhos teóricos anteriores [71, 72]. Seria interessante, contudo, o desenvolvimento de uma abordagem microscópica que fosse capaz de explicar a diferença entre as ordens de magnitude das razões entre as constantes de acoplamento da condutividade microscópica para o caso dos sais orgânicos (2D), em relação ao caso do óxido de Vanádio (3D).

Já nos isolantes de Mott dopados que apresentam fases de listras de carga passíveis de serem descritas pelo modelo de Brazovskii (niquelatos e cupratos), a condutividade macroscópica não é linearmente proporcional ao valor médio do parâmetro de ordem pelo simples fato de ele se anular por causa da neutralidade do sistema. Considerando apenas a contribuição do contraste entre as condutividades microscópicas, e usando, novamente, a expansão perturbativa para a condutividade de uma rede de resistores correlacionados, mostramos que a condutividade global depende, em ordem mais baixa na teoria de perturbação, da função de correlação de dois pontos não-conectada. Assim, fazendo uso do modelo de Brazovskii para descrever a termodinâmica do parâmetro de ordem, determinamos as propriedades de transporte do sistema. Para a fase de listras com ordenamento esmético, observamos que a anisotropia da mesofase eletrônica é refletida por uma anisotropia da condutividade global, que passa a depender do ângulo entre a direção da corrente aplicada e a direção de modulação das listras. Além disso, quando o sistema sofre a transição de Brazovskii da fase desordenada para a fase de listras, ocorre uma descontinuidade na condutividade, em acordo qualitativo com medidas de resistividade envolvendo os niquelatos [82, 83, 84]. Mostramos que não só o módulo, mas também o sinal deste salto na condutividade, dependem da direção em que ela é medida. Como a mudança de sinal do salto está associada ao espectro de flutuações particular do modelo de Brazovskii, ela pode ser usada como um critério para se decidir sobre a aplicabilidade deste modelo na descrição das listras de carga encontradas nos niquelatos. Assim, estes resultados não só auxiliam na elucidação das propriedades de transporte dos niquelatos, como também exploram os limites de validade da descrição da fase de listras de carga observadas nestes compostos pela solução de campo médio auto-consistente da Hamiltoniana de Brazovskii.

No caso em que a fase de listras é derretida pelas flutuações elásticas, dando origem a uma fase nemática, usamos o mesmo formalismo para calcular a condutividade macroscópica do sistema, propondo um cenário bastante claro e intuitivo para a investigação de suas propriedades de transporte. Obtivemos que, em ordem mais baixa da expansão perturbativa, a anisotropia da condutividade é linearmente proporcional ao parâmetro de ordem nemático, em acordo com outra abordagem completamente distinta ao problema do transporte eletrônico em fases nemáticas, que leva em conta apenas flutuações quânticas, e não clássicas, através de simulações numéricas [17]. Assim, tal relação linear entre uma quantidade de transporte e uma quantidade termodinâmica pode ser de extrema utilidade no entendimento das propriedades físicas das fases de listras dos cupratos, que acredita-se possuírem ordenamento nemático, e não esmético [28, 85, 86, 88]. Neste contexto, seria bastante produtivo investigar profundamente o caso em que estes dois modos de flutuações estivessem presentes, de modo que fosse possível distinguir os efeitos próprios de cada um deles. Além disso, como as flutuações elásticas são sempre intensas em duas dimensões, seria de extrema valia uma modelagem dinâmica que pudesse levar em conta a sua influência em medidas de séries temporais e ruídos da resistividade. Em particular, uma investigação que pudesse determinar os tipos de ruído provocados pelas flutuações elásticas, em comparação com aqueles gerados pelas flutuações quânticas, seria bastante interessante. Por fim, vale salientar que a solução perturbativa geral da rede de resistores correlacionados abre uma gama de possibilidades para a investigação das propriedades de transporte de várias outras fases não-triviais, como os vidros de spin e listras na presença de desordem estrutural tipo campo aleatório.
Referências Bibliográficas

- M. Seul and D. Andelman. Domain shapes and patterns: the phenomenology of modulated phases. Science, 267(5197):476-483, 1995.
- [2] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin. Solid State Physics. Holt, Rinehart and Winston New York, 1976.
- [3] P. Fazekas. Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism. World Scientific, 1999.
- [4] P.G. de Gennes. The Physics of Liquid Crystals. Clarendon Press, 1974.
- [5] M. Doi. Introduction to Polymer Physics. Oxford University Press, 1996.
- [6] T. Garel and S. Doniach. Phase transitions with spontaneous modulation-the dipolar Ising ferromagnet. *Physical Review B*, 26(1):325-329, 1982.
- [7] T. Ohta and K. Kawasaki. Equilibrium morphology of block copolymer melts. *Macromolecules*, 19(10):2621-2632, 1986.
- [8] S.A. Brazovskii. Phase transition of an isotropic system to an inhomogeneous state. Zhurnal Eksperimentalnoi i Teoreticheskoi Fiziki, 68(1):175-85, 1975.
- [9] P.M. Chaikin and T.C. Lubensky. Principles of Condensed Matter Physics. Cambridge University Press, 1995.
- [10] A. M. Dyugaev. Character of the phase transition in π condensation. Pis'ma v Zhurnal Eksperimentalnoi i Teoreticheskoi Fiziki, 22:181–185, 1975.
- [11] J. Toner and D.R. Nelson. Smectic, cholesteric, and Rayleigh-Benard order in two dimensions. *Physical Review B*, 23(1):316-334, 1981.
- [12] E.C. Stoner and E.P. Wohlfarth. A mechanism of magnetic hysteresis in heterogeneous alloys. *Philosophical Transactions A*, 240:599-644, 1948.
- [13] L.N. Coelho, B.R.A. Neves, R. Magalhães-Paniago, F.C. Vicentin, H. Westfahl Jr, R.M. Fernandes, F. Iikawa, L. Däweritz, C. Spezzani, and M. Sacchi. Magnetic reconfiguration of MnAs/GaAs (001) observed by magnetic force microscopy and resonant soft x-ray scattering. *Journal of Applied Physics*, 100:083906, 2006.
- [14] R. M. Fernandes and H. Westfahl Jr. Fluctuation induced first-order phase transitions in a dipolar Ising ferromagnetic slab. *Physical Review B*, 74(14):144421, 2006.
- [15] R.M. Fernandes, H. Westfahl Jr, R. Magalhães-Paniago, and L.N. Coelho. Domain wall formation and spin reorientation in finite-size magnetic systems. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 312(2):314-323, 2007.
- [16] V.J. Emery and S.A. Kivelson. Frustrated electronic phase separation and high-temperature superconductors. *Physica C*, 209(4):597-621, 1993.
- [17] E.W. Carlson, K.A. Dahmen, E. Fradkin, and S.A. Kivelson. Hysteresis and noise from electronic nematicity in high-temperature superconductors. *Physical Review Letters*, 96(9):97003, 2006.
- [18] S. Papanikolaou, R.M. Fernandes, E. Fradkin, P.W. Phillips, J. Schmalian, and R. Sknepnek.

Universality of liquid-gas Mott transitions at finite temperatures. *Physical Review Letters*, 100(2):026408, 2008.

- [19] R.M. Fernandes, J. Schmalian, and H. Westfahl Jr. Conductivity of electronic mesophases. submitted, 2008.
- [20] V.J. Emery, S.A. Kivelson, and J.M. Tranquada. Stripe phases in high-temperature superconductors. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 96(16):8814, 1999.
- [21] T.H. Odell. Magnetic bubble domain devices. Reports on Progress in Physics, 49:589-620, 1986.
- [22] H. Hasegawa and T. Hashimoto. Morphology of block copolymers and mixtures of block copolymers at free surfaces. *Polymer*, 33(3):475-487, 1987.
- [23] P.G. De Gennes and C. Taupin. Microemulsions and the flexibility of oil/water interfaces. The Journal of Physical Chemistry, 86(13):2294-2304, 1982.
- [24] J. Schmalian and P.G. Wolynes. Uniting the sciences of "Hard" and "Soft" Matter. MRS Bulletin, 30:433, 2005.
- [25] H. Westfahl Jr, J. Schmalian, and P.G. Wolynes. Self-generated randomness, defect wandering, and viscous flow in stripe glasses. *Physical Review B*, 64(17):174203, 2001.
- [26] U. Löw, V.J. Emery, K. Fabricius, and S.A. Kivelson. Study of an Ising model with competing long-and short-range interactions. *Physical Review Letters*, 72(12):1918-1921, 1994.
- [27] S. Wu, H. Westfahl Jr, J. Schmalian, and P.G. Wolynes. Theory of microemulsion glasses. Chemical Physics Letters, 359(1-2):1-7, 2002.
- [28] S.A. Kivelson, Fradkin E., and Emery V.J. Electronic liquid-crystal phases of a doped Mott insulator. *Nature*, 393:550-553, 1998.
- [29] M.E. Fisher. Renormalization group theory: its basis and formulation in statistical physics. *Reviews of Modern Physics*, 70(2):653-681, 1998.
- [30] S.K. Ma. Modern Theory of Critical Phenomena. Perseus Books, 2000.
- [31] P.C. Hohenberg and J.B. Swift. Metastability in fluctuation-driven first-order transitions: nucleation of lamellar phases. *Physical Review E*, 52(2):1828-1845, 1995.
- [32] G.H. Fredrickson and K. Binder. Kinetics of metastable states in block copolymer melts. The Journal of Chemical Physics, 91:7265, 1989.
- [33] K. Binder. Theory of first-order phase transitions. Reports on Progress in Physics, 50(7):783-859, 1987.
- [34] M. Grousson, G. Tarjus, and P. Viot. Monte Carlo study of the three-dimensional Coulomb frustrated Ising ferromagnet. *Physical Review E*, 64(3):36109, 2001.
- [35] S.A. Cannas, D.A. Stariolo, and F.A. Tamarit. Stripe-tetragonal first-order phase transition in ultrathin magnetic films. *Physical Review B*, 69(9):92409, 2004.
- [36] J.W. Negele and H. Orland. Quantum Many-Particle Systems. Perseus Books, 1998.
- [37] J. Schmalian and P.G. Wolynes. Stripe glasses: self-generated randomness in a uniformly frustrated system. *Physical Review Letters*, 85(4):836–839, 2000.
- [38] H. Westfahl Jr and J. Schmalian. Correlated disorder in random block copolymers. *Physical Review E*, 72(1):11806, 2005.
- [39] D.G. Barci and D.A. Stariolo. Competing interactions, the renormalization group, and the isotropic-nematic phase transition. *Physical Review Letters*, 98(20):200604, 2007.
- [40] R. Shankar. Renormalization-group approach to interacting fermions. Reviews of Modern Physics, 66(1):129-192, 1994.
- [41] L.D. Landau and E.M. Lifshitz. Theory of Elasticity. 1986.

- [42] N.D. Mermin. The topological theory of defects in ordered media. Reviews of Modern Physics, 51(3):591-648, 1979.
- [43] A. Abanov, V. Kalatsky, V.L. Pokrovsky, and W.M. Saslow. Phase diagram of ultrathin ferromagnetic films with perpendicular anisotropy. *Physical Review B*, 51(2):1023-1038, 1995.
- [44] L. Däweritz. Interplay of stress and magnetic properties in epitaxial MnAs films. Reports on Progress in Physics, 69(9):2581-2629, 2006.
- [45] M. Tanaka. Ferromagnet (MnAs)/III-V semiconductor hybrid structures. Semiconductor Science and Technology, 17(4):327-341, 2002.
- [46] C.P. Bean and D.S. Rodbell. Magnetic disorder as a first-order phase transformation. *Physical Review*, 126(1):104-115, 1962.
- [47] V.M. Kaganer, B. Jenichen, F. Schippan, W. Braun, L. Däweritz, and K.H. Ploog. Strain-mediated phase coexistence in MnAs heteroepitaxial films on GaAs: an x-ray diffraction study. *Physical Review B*, 66(4):45305, 2002.
- [48] A. Ney, T. Hesjedal, C. Pampuch, A.K. Das, L. Däweritz, R. Koch, K.H. Ploog, T. Toliński, J. Lindner, K. Lenz, and K. Baberschke. Nature of the magnetic and structural phase transition in MnAs/GaAs (001). *Physical Review B*, 69(8):81306, 2004.
- [49] R. Engel-Herbert, J. Mohanty, A. Ney, T. Hesjedal, L. Däweritz, and K.H. Ploog. Understanding the submicron domain structure of MnAs thin films on GaAs (001): magnetic force microscopy measurements and simulations. *Applied Physics Letters*, 84:1132, 2004.
- [50] R. Magalhães-Paniago, L.N. Coelho, B.R.A. Neves, H. Westfahl Jr, F. Iikawa, L. Däweritz, C. Spezzani, and M. Sacchi. X-ray method to study temperature-dependent stripe domains in MnAs/ GaAs (001). Applied Physics Letters, 86:053112, 2005.
- [51] F. Iikawa, M. Knobel, P.V. Santos, C. Adriano, O.D.D. Couto, M. Brasil, C. Giles, R. Magalhães-Paniago, and L. Däweritz. Effect of a magnetic field on the magnetostructural phase transition of MnAs films on GaAs. *Physical Review B*, 71(4):45319, 2005.
- [52] L. Däweritz and C. Herrmann. Self-organization and finite size effects in epitaxial ferromagnetic MnAs films on GaAs. *Physica status solidi B*, 244(8):2936-2943, 2007.
- [53] A. Aharoni. Introduction to the Theory of Ferromagnetism. Oxford University Press, 2001.
- [54] J. Rudnick, G. Gaspari, and V. Privman. Effect of boundary conditions on the critical behavior of a finite high-dimensional Ising model. *Physical Review B*, 32(11):7594-7596, 1985.
- [55] V. Dohm. Diagrammatic perturbation approach to finite-size and surface critical behavior for Dirichlet boundary conditions. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 75(1):109-118, 1989.
- [56] J.D. Jackson. Classical Electrodynamics. John Wiley & Sons, New York, 1975.
- [57] A.B. MacIsaac, J.P. Whitehead, M.C. Robinson, and K. DeBell. Striped phases in two-dimensional dipolar ferromagnets. *Physical Review B*, 51(22):16033-16045, 1995.
- [58] I. Booth, A.B. MacIsaac, J.P. Whitehead, and K. DeBell. Domain structures in ultrathin magnetic films. *Physical Review Letters*, 75(5):950-953, 1995.
- [59] S.A. Cannas, M.F. Michelon, D.A. Stariolo, and F.A. Tamarit. Ising nematic phase in ultrathin magnetic films: a Monte Carlo study. *Physical Review B*, 73(18):184425, 2006.
- [60] N.D. Mermin and H. Wagner. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one-or two-dimensional isotropic Heisenberg models. *Physical Review Letters*, 17(22):1133-1136, 1966.
- [61] S. V. Maleev. Dipole forces in 2-dimensional and lamellar ferromagnets substances. Zhurnal Eksperimentalnoi i Teoreticheskoi Fiziki, 70:2374-2389, 1976.
- [62] P.G. Maier and F. Schwabl. Ferromagnetic ordering in the two-dimensional dipolar XY model. *Physical Review B*, 70(13):134430, 2004.
- [63] F. Schippan, G. Behme, L. Däweritz, K.H. Ploog, B. Dennis, K.U. Neumann, and K.R.A. Ziebeck.

Magnetic structure of epitaxially grown MnAs on GaAs (001). Journal of Applied Physics, 88:2766, 2000.

- [64] J. Lindner, T. Toliński, K. Lenz, E. Kosubek, H. Wende, K. Baberschke, A. Ney, T. Hesjedal, C. Pampuch, R. Koch, L. Däweritz, and K.H. Ploog. Magnetic anisotropy of MnAs-films on GaAs (001) studied with ferromagnetic resonance. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 277(1-2):159-164, 2004.
- [65] Y. Imry and M. Wortis. Influence of quenched impurities on first-order phase transitions. *Physical Review B*, 19(7):3580-3585, 1979.
- [66] R. Engel-Herbert, T. Hesjedal, J. Mohanty, D.M. Schaadt, and K.H. Ploog. Magnetization reversal in MnAs films: magnetic force microscopy, SQUID magnetometry, and micromagnetic simulations. *Physical Review B*, 73(10):104441, 2006.
- [67] Y. Takagaki, C. Herrmann, E. Wiebicke, J. Herfort, L. Däweritz, and K.H. Ploog. Slow relaxation of magnetization in MnAs nanomagnets on GaAs (001). *Applied Physics Letters*, 88:032504, 2006.
- [68] N.F. Mott. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals. Proceedings of the Physical Society of London, Section A, 62(7):416-422, 1949.
- [69] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura. Metal-insulator transitions. Reviews of Modern Physics, 70(4):1039-1263, 1998.
- [70] D.B. McWhan, A. Menth, J.P. Remeika, W.F. Brinkman, and T.M. Rice. Metal-insulator transitions in pure and doped V₂O₃. *Physical Review B*, 7(5):1920-1931, 1973.
- [71] C. Castellani, C.D. Castro, D. Feinberg, and J. Ranninger. New model Hamiltonian for the metal-insulator transition. *Physical Review Letters*, 43(26):1957-1960, 1979.
- [72] G. Kotliar, E. Lange, and M.J. Rozenberg. Landau theory of the finite temperature Mott transition. *Physical Review Letters*, 84(22):5180-5183, 2000.
- [73] P. Limelette, A. Georges, D. Jerome, P. Wzietek, P. Metcalf, and J.M. Honig. Universality and critical behavior at the Mott transition. *Science*, 302(5642):89-92, 2003.
- [74] F. Kagawa, K. Miyagawa, and K. Kanoda. Unconventional critical behaviour in a quasi-two-dimensional organic conductor. *Nature*, 436(7050):534-537, 2005.
- [75] J. Singleton and C. Mielke. Quasi two-dimensional organic superconductors: a review. Contemporary Physics, 43(2):63-96, 2002.
- [76] T. Misawa, Y. Yamaji, and M. Imada. Quantum critical "opalescence" around metal-insulator transitions. Journal of the Physical Society of Japan, 75(8):083705-083705, 2006.
- [77] J.G. Bednorz and K.A. Müller. Possible high-T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 64(2):189–193, 1986.
- [78] J. Orenstein and AJ Millis. Advances in the physics of high-temperature superconductivity. Science, 288(5465):468-75, 2000.
- [79] J. Zaanen and O. Gunnarsson. Charged magnetic domain lines and the magnetism of high-t_c oxides. Physical Review B, 40(10):7391-7394, 1989.
- [80] R. Klingeler, B. Büchner, S.W. Cheong, and M. Hücker. Weak ferromagnetic spin and charge stripe order in La_{5/3}Sr_{1/3}NiO₄. *Physical Review B*, 72(10):104424, 2005.
- [81] E.W. Carlson, V.J. Emery, S.A. Kivelson, and D. Orgad. Concepts in high temperature superconductivity. Arxiv preprint cond-mat/0206217, 2002.
- [82] S.W. Cheong, H.Y. Hwang, C.H. Chen, B. Batlogg, L.W. Rupp Jr, and S.A. Carter. Charge-ordered states in $(La, Sr)_2NiO_4$ for hole concentrations $n_h = 1/3$ and 1/2. *Physical Review B*, 49(10):7088-7091, 1994.
- [83] M. Huecker, M. Zimmermann, and G.D. Gu. Robust charge stripe order under high electric fields in Nd_{1.67}Sr_{0.33}NiO₄. *Physical Review B*, 75(4):041103, 2007.

- [84] A. Pautrat, F. Giovannelli, and N. Poirot. Nonlinear electronic transport and anomalous resistance fluctuations in the stripe state of La₂NiO_{4.14}. *Physical Review B*, 75(12):125106, 2007.
- [85] Y. Ando, K. Segawa, S. Komiya, and A.N. Lavrov. Electrical resistivity anisotropy from self-organized one dimensionality in high-temperature superconductors. *Physical Review Letters*, 88(13):137005, 2002.
- [86] A.N. Lavrov, I. Tsukada, and Y. Ando. Normal-state conductivity in underdoped La_{2-x}Sr_xCuO₄ thin films: search for nonlinear effects related to collective stripe motion. *Physical Review B*, 68(9):094506, 2003.
- [87] J.A. Bonetti, D.S. Caplan, D.J. Van Harlingen, and M.B. Weissman. Electronic transport in underdoped YBa₂Cu₃O_{7- δ} nanowires: evidence for fluctuating domain structures. *Physical Review Letters*, 93(8):87002, 2004.
- [88] V. Hinkov, D. Haug, B. Fauque, P. Bourges, Y. Sidis, A. Ivanov, C. Bernhard, C.T. Lin, and B. Keimer. Electronic liquid crystal state in the high-temperature superconductor YBa₂Cu₃O_{6.45}. *Science*, 319(5863):597, 2008.
- [89] E. Fradkin, S.A. Kivelson, E. Manousakis, and K. Nho. Nematic phase of the two-dimensional electron gas in a magnetic field. *Physical Review Letters*, 84(9):1982-1985, 2000.
- [90] D. G. Barci and E. Fradkin. Theory of the quantum Hall smectic phase II: Microscopic theory. *Physical Review B*, 65(24):245320, Jun 2002.
- [91] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M.J. Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Reviews of Modern Physics*, 68(1):13-125, 1996.
- [92] A. Auerbach. Interacting Electrons and Quantum Magnetism. Springer, 1994.
- [93] J.A. Reynolds and J.M. Hough. Formulae for dielectric constant of mixtures. Proceedings of the Physical Society, Section B, 70(8):769-775, 1957.
- [94] M.B. Isichenko. Percolation, statistical topography, and transport in random media. Reviews of Modern Physics, 64(4):961-1043, 1992.
- [95] D. Stauffer and A. Aharony. Introduction to Percolation Theory. Taylor & Francis, 1992.
- [96] G. Hurvits, R. Rosenbaum, and D.S. McLachlan. A quantitative analysis of the thermoelectric power measurements on composite Al-Ge films. *Journal of Applied Physics*, 73:7441, 1993.
- [97] M. Mayr, A. Moreo, J.A. Vergés, J. Arispe, A. Feiguin, and E. Dagotto. Resistivity of mixed-phase manganites. *Physical Review Letters*, 86(1):135-138, 2001.
- [98] M.M. Parish and P.B. Littlewood. Non-saturating magnetoresistance in heavily disordered semiconductors. *Nature*, 426(6963):162-165, 2003.
- [99] M.J. Stephen. Mean-field theory and critical exponents for a random resistor network. *Physical Review B*, 17(11):444-4453, 1978.
- [100] A.B. Harris and T.C. Lubensky. Randomly diluted xy and resistor networks near the percolation threshold. *Physical Review B*, 35(13):6964-6986, 1987.
- [101] A. Weinrib. Long-range correlated percolation. Physical Review B, 29(1):387-395, 1984.
- [102] P.J.M. Bastiaansen and H.J.F. Knops. Correlated percolation and the correlated resistor network. Journal of Physics A: Mathematical and General, 30(6):1791-1801, 1997.
- [103] J.A. Blackman. A theory of conductivity in disordered resistor networks. Journal of Physics C: Solid State Physics, 9(11):2049-2071, 1976.
- [104] P.C. Hohenberg and B.I. Halperin. Theory of dynamic critical phenomena. Reviews of Modern Physics, 49(3):435-479, 1977.
- [105] M.E. Fisher and J.S. Langer. Resistive anomalies at magnetic critical points. Physical Review Letters, 20(13):665-668, 1968.

- [106] L. Onsager. A two-dimensional model with an order-disorder transition. Physical Review, 65:117-149, 1944.
- [107] C.N. Yang. The spontaneous magnetization of a two-dimensional Ising model. *Physical Review*, 85(5):808-816, 1952.
- [108] E.W. Montroll, R.B. Potts, and J.C. Ward. Correlations and spontaneous magnetization of the two-dimensional Ising model. *Journal of Mathematical Physics*, 4:308, 1963.
- [109] J. Stephenson. Ising-model spin correlations on the triangular lattice. Journal of Mathematical Physics, 5:1009, 1964.
- [110] J. Groeneveld, R.J. Boel, and P.W. Kasteleyn. Correlation-function identities for general planar Ising systems. *Physica A*, 93(1-2):138-154, 1978.
- [111] R.K. Ghosh and R.E. Shrock. Exact expressions for diagonal correlation functions in the d = 2Ising model. *Physical Review B*, 30(7):3790-3794, 1984.
- [112] R.K. Ghosh and R.E. Shrock. Exact expressions for row correlation functions in the isotropic d = 2 Ising model. Journal of Statistical Physics, 38(3):473-482, 1985.
- [113] J.H. Barry, T. Tanaka, M. Khatun, and C.H. Múnera. Exact solutions for Ising-model odd-number correlations on planar lattices. *Physical Review B*, 44(6):2595-2608, 1991.
- [114] U. Wolff. Collective Monte Carlo updating for spin systems. Physical Review Letters, 62(4):361-364, 1989.
- [115] D.J. Frank and C.J. Lobb. Highly efficient algorithm for percolative transport studies in two dimensions. *Physical Review B*, 37(1):302-307, 1988.
- [116] S. Ravy, R. Moret, and J.P. Pouget. Explanation of the phase diagram of β -di [bis (ethylenedithio) tetrathiafulvalene] triiodide based on the two configurations of the organic molecule. *Physical Review B*, 38(7):4469-4480, 1988.
- [117] T. Nattermann. Spin Glasses and Random Fields. Singapore: World Scientific, 1998.
- [118] O. Zachar and I. Zaliznyak. Dimensional crossover and charge order in half-doped manganites and cobaltites. *Physical Review Letters*, 91(3):36401, 2003.
- [119] M. de Souza, A. Brühl, Ch. Strack, B. Wolf, D. Schweitzer, and M. Lang. Anomalous lattice response at the Mott transition in a quasi-2D organic conductor. *Physical Review Letters*, 99(3):037003, 2007.
- [120] P. Wochner, J.M. Tranquada, D.J. Buttrey, and V. Sachan. Neutron-diffraction study of stripe order in La₂NiO_{4+ δ} with $\delta = 2/15$. *Physical Review B*, 57(2):1066–1078, 1998.
- [121] V.L. Berezinskii. Destruction of long-range order in one-dimensional and two-dimensional systems having a continuous symmetry group. Soviet Physics JETP, 34(3):610-616, 1972.
- [122] J.M. Kosterlitz and D.J. Thouless. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. Journal of Physics C: Solid State Physics, 6(7):1181-1203, 1973.
- [123] P. Minnhagen. The two-dimensional Coulomb gas, vortex unbinding, and superfluid-superconducting films. *Reviews of Modern Physics*, 59(4):1001-1066, 1987.
- [124] J. Hubbard. Calculation of partition functions. Physical Review Letters, 3(2):77-78, 1959.
- [125] R.L. Stratonovich. On a method of calculating quantum distribution functions. Soviet Physics Doklady, 2:416, 1957.
- [126] S. Havlin and D. Ben-Avraham. Diffusion in disordered media. Advances in Physics, 51(1):187-292, 2002.
- [127] B.I. Shklovskii and A.L. Efros. Electronic Properties of Doped Semiconductors. Springer-Verlag, 1984.
- [128] O. Stenull, H.K. Janssen, and K. Oerding. Critical exponents for diluted resistor networks. *Physical Review E*, 59(5):4919-4930, 1999.

[129] A.L. Stella and C. Vanderzande. Scaling and fractal dimension of Ising clusters at the d = 2 critical point. *Physical Review Letters*, 62(10):1067–1070, 1989.

Apêndice A

Transição de Kosterlitz-Thouless

Consideremos um sistema bidimensional cujo parâmetro de ordem conservado possua duas componentes, de modo que ele possa ser caracterizado por um ângulo θ . Consideremos, ainda, que as excitações elásticas deste parâmetro de ordem sejam descritas pela Hamiltoniana quadrática:

$$\mathcal{H}\left[\theta\right] = \frac{K}{2} \int d^2 x \left[\vec{\nabla}\theta\left(\vec{x}\right)\right]^2 \,,\tag{A.1}$$

em que K é chamada de rigidez generalizada (estamos considerando, a exemplo do que fizemos durante o texto principal, que o parâmetro K é dado em unidades da energia térmica k_BT). Este é o caso, por exemplo, das excitações tipo ondas de spin no modelo XY, das flutuações da fase da função de onda de um superfluido e dos modos de flutuação do diretor de uma fase nemática, conforme explicado na seção 1.4. Mesmo não possuindo ordem de longo alcance devido à atuação das excitações elásticas (teorema de Mermin-Wagner [60]), o sistema possui ordem de quase-longo alcance, ou seja, sua função de correlação não-conectada decai polinomialmente com a distância entre os pontos. Este resultado pode ser obtido diretamente através do cálculo de integrais de trajetória gaussianas envolvendo o parâmetro de ordem exp $(-iN\theta)$, em que N é um número natural:

$$\left\langle e^{Ni\theta(\vec{x})}e^{-Ni\theta(0)}\right\rangle_{elast} = (\Lambda r)^{-\frac{N^2}{2\pi K}}$$
 (A.2)

Na expressão acima, Λ denota o *cutoff* ultravioleta apropriado e $r = |\vec{x}|$. Entretanto, esta função de correlação não contempla a contribuição dos defeitos topológicos que aparecem nestes tipos de sistemas, caracterizados por:

$$\oint_{\Gamma} \vec{\nabla} \theta_s \cdot d\vec{l} = 2\pi\kappa \,. \tag{A.3}$$

Conforme mostraremos a seguir, com o aumento da temperatura, a proliferação de pares ligados destes defeitos leva a uma progressiva diminuição da rigidez, até que ela se anula a uma certa temperatura crítica. Neste ponto, a função de correlação deixa de cair polinomialmente com a distância e o sistema perde sua ordem de quase-longo alcance, passando para um estado completamente desordenado, sobre o qual circulam defeitos topológicos isolados: é a transição de Kosterlitz-Thouless, também chamada de transição de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless [121, 122]. Durante o texto principal, ela surgiu no contexto da transição entre uma fase nemática e uma fase líquida isotrópica induzida por disclinações, cujas cargas topológicas κ podem assumir valores semi-inteiros. Neste apêndice, ao invés de nos referirmos a um sistema de diretores nemáticos, vamos considerar uma rede de spins planares, pois a visualização dos conceitos envolvidos - em

particular, dos defeitos topológicos - é razoavelmente mais clara. Seguiremos principalmente a abordagem de [9] para o problema. A generalização para o caso das disclinações em uma fase nemática pode ser feita sem maiores dificuldades e de maneira direta.

Para uma rede de spins planares interagindo segundo o modelo XY, os defeitos topológicos (A.3) são vórtices magnéticos. Neste contexto, a carga topológica só assume valores inteiros, indicando o número de voltas que o spin dá quando se completa um circuito fechado em torno do núcleo de um vórtice. Dentro deste núcleo singular, caracterizado por um tamanho típico que denotaremos por a, assume-se que o parâmetro de ordem se anula¹. A expressão que descreve um vórtice é obtida através da minimização da Hamiltoniana (A.1), sujeita à condição de contorno (A.3):

$$\theta_s(x,y) = \kappa \arctan\left(\frac{y}{x}\right).$$
(A.4)

Substituindo em (A.1), vemos que a energia de um vórtice isolado é dada por $E_v = \pi \kappa^2 K \ln \left(\frac{R}{a}\right)$, em que R denota o tamanho linear do sistema. Claramente, E_v diverge no limite termodinâmico, o que não quer dizer, contudo, que o sistema não suporte vórtices. Para ver isso, estimemos a entropia associada à presença de um vórtice de carga topológica unitária $\kappa = 1$: como seu núcleo ocupa uma área a^2 e o sistema tem área total R^2 , temos que:

$$S = k_B \ln\left(\frac{R^2}{a^2}\right) = 2k_B \ln\left(\frac{R}{a}\right) \,. \tag{A.5}$$

Logo, a energia livre $\beta F = E_v - S$ muda de sinal para $K_c = 2/\pi$, sendo positiva para temperaturas inferiores ($K > K_c$) e negativa para temperaturas superiores ($K < K_c$). Portanto, é de se esperar que vórtices isolados proliferem a partir de uma certa temperatura. Contudo, isto não significa que, abaixo desta temperatura, o sistema esteja livre de vórtices, pois eles podem surgir como pares ligados de vórtices e anti-vórtices. Ao contrário de vórtices isolados, um par de vorticidade total nula distorce apenas os spins próximos aos núcleos, deixando o sistema assintoticamente uniforme. Além disso, há uma interação efetiva atrativa entre vórtices de cargas topológicas opostas, que contribui para minimizar a energia do sistema.

Para chegar a este resultado, devemos calcular a energia de um configuração arbitrária de vórtices. Assim, tomemos a expressão de um único vórtice (A.4), e denominemos o seu gradiente de \vec{v}_s , ou seja, $\vec{v}_s = \vec{\nabla} \theta_s$. A densidade de vórtices $\vec{m}_s(\vec{x})$ é dada por $\vec{m}_s = \vec{\nabla} \times \vec{v}_s$, já que, pelo Teorema de Stokes:

$$\int \int \vec{m}_s \cdot d\vec{a} = \oint_{\Gamma} \vec{v}_s \cdot d\vec{l} = 2\pi \sum_{i=1}^N \kappa_i \,. \tag{A.6}$$

Para obtermos a relação inversa, isto é, $\vec{v_s}$ em função de $\vec{m_s}$, podemos tomar o rotacional da densidade:

$$\vec{\nabla} \times \vec{m}_s = \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{v}_s = -\nabla^2 \vec{v}_s \,, \tag{A.7}$$

em que usamos o fato de $\vec{\nabla} \cdot \vec{v}_s = 0$, já que θ_s satisfaz a equação de Laplace, pois minimiza

 $^{^1}$ É importante não confundir esta notação com o "a" referente ao parâmetro de rede de uma rede cúbica, que não aparecerá neste apêndice.

a Hamiltoniana (A.1). Agora, introduzindo a função de Green para o operador Laplaciano em duas dimensões:

$$\nabla^2 \mathcal{C} \left(\vec{x} - \vec{x}' \right) = -\delta \left(\vec{x} - \vec{x}' \right) \,, \tag{A.8}$$

podemos escrever:

$$\vec{v}_s\left(\vec{x}\right) = \vec{\nabla} \times \int d^2 x' \mathcal{C}\left(\vec{x} - \vec{x}'\right) \vec{m}_s\left(\vec{x}'\right) \,. \tag{A.9}$$

Substituindo \vec{v}_s na Hamiltoniana (A.1):

$$\mathcal{H} = \frac{K}{2} \int d^2 x v_s^2 \left(\vec{x} \right) \,, \tag{A.10}$$

chegamos, após cálculos diretos, à expressão da energia E'_s associada a uma configuração qualquer de vórtices:

$$E'_{s} = \frac{K}{2} \int d^{2}x d^{2}x' \vec{m}_{s}\left(\vec{x}\right) \cdot \mathcal{C}\left(\vec{x} - \vec{x}'\right) \vec{m}_{s}\left(\vec{x}'\right) \,. \tag{A.11}$$

A função de Green (A.8) pode ser obtida facilmente no espaço de Fourier, $C_{\vec{q}} = q^{-2}$. Para escrevê-la no espaço real, deve-se restringir o intervalo de integração para $a < |\vec{x} - \vec{x}'| < R$, já que o parâmetro de ordem se anula dentro do núcleo. Nos limites $|\vec{x} - \vec{x}'| \ll R$ e $|\vec{x} - \vec{x}'| \gg a$, obtemos:

$$\mathcal{C}\left(\vec{x} - \vec{x}'\right) = \frac{1}{2\pi} \left\{ \ln\left(\frac{R}{a}\right) - \ln\left(\frac{|\vec{x} - \vec{x}'|}{a}\right) + \operatorname{cte} \right\} \,. \tag{A.12}$$

Como os vórtices residem no plano xy, podemos definir uma densidade escalar de vórtices $n(\vec{x})$, dada por:

$$\vec{m}_s\left(\vec{x}\right) = 2\pi n\left(\vec{x}\right)\hat{z} \quad \Rightarrow \quad n\left(\vec{x}\right) = \sum_i \kappa_i \delta\left(\vec{x} - \vec{x}_i\right) \,. \tag{A.13}$$

Assim, a energia da configuração arbitrária de vórtices é expressa por:

$$E'_{s} = \pi K \ln\left(\frac{R}{a}\right) \left[\int d^{2}x n\left(\vec{x}\right)\right]^{2} - \pi K \int d^{2}x d^{2}x' n\left(\vec{x}\right) \ln\left(\frac{|\vec{x} - \vec{x}'|}{a}\right) n\left(\vec{x}'\right)$$
$$E'_{s} = \pi K \ln\left(\frac{R}{a}\right) \left[\sum_{i} \kappa_{i}\right]^{2} - \pi K \sum_{i,j} \kappa_{i} \ln\left(\frac{|\vec{x}_{i} - \vec{x}_{j}|}{a}\right) \kappa_{j}.$$
(A.14)

O primeiro termo, proporcional à vorticidade total do sistema, diverge no limite termodinâmico. Portanto, as configurações possíveis de serem excitadas termicamente são aquelas cuja vorticidade total se anula. O segundo termo corresponde a uma interação efetiva atrativa (repulsiva) entre vórtices com cargas topológicas de sinais opostos (iguais), pois $-\ln(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|/a)$ é uma função monotonicamente decrescente da distância $|\vec{x}_i - \vec{x}_j|$ entre dois vórtices. Para completar esta análise, devemos incluir ainda a energia de criação dos núcleos individuais E_c , a qual pode-se mostrar ser proporcional ao quadrado da carga topológica [9]. Portanto, restringindo as possíveis configurações àquelas com vorticidade total nula, temos a seguinte expressão para a energia total:

$$E_s = -\pi K \sum_{i,j} \kappa_i \ln\left(\frac{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|}{a}\right) \kappa_j + \frac{E_c}{k_B T} \sum_i \kappa_i^2.$$
(A.15)

Logo, as excitações de mais baixa energia do sistema são pares de vórtices e anti-vórtices com carga topológica unitária $|\kappa_i| = 1$. A energia de interação (A.15) é equivalente à de um gás de Coulomb neutro bidimensional cujas cargas demandam um custo energético E_c para serem criadas. Além disso, esta expressão pode ser mapeada em uma teoria de campo conhecida como sine-Gordon, de modo que todas as propriedades do sistema podem ser obtidas através de métodos envolvendo integrais de trajetória [123]. Contudo, não é do escopo deste trabalho enveredar por esta área.

Tomemos um par ligado de vórtices com cargas opostas: conforme a temperatura aumenta, surgem, no espaço entre eles, mais e mais pares de vórtices ligados, o que acaba por diminuir a energia de atração entre as cargas do par inicial. Usando a analogia com o gás de Coulomb, este processo é equivalente ao aumento da permissividade elétrica do meio isolante original devido à proliferação de dipolos elétricos termicamente induzidos. Assim, a uma certa temperatura, é de se esperar que esta contínua excitação de novos pares torne nula a interação efetiva entre vórtices de cargas opostas, deixando os pares desligados, de modo que vórtices isolados comecem a circular pelo sistema. Este é o significado físico da transição de Kosterlitz-Thouless; no que se segue, vamos explorá-la mediante o cálculo da rigidez renormalizada.

A contribuição dos defeitos topológicos para a função de correlação (A.2) pode ser calculada através de uma expansão em cumulantes:

$$\left\langle e^{i\theta_s(\vec{x})} e^{-i\theta_s(0)} \right\rangle_{vort} = e^{-\left\langle (\theta_s(\vec{x}) - \theta_s(0))^2 \right\rangle/2} .$$
(A.16)

Como as excitações topológicas são transversais, enquanto as excitações elásticas são longitudinais, estes dois modos estão desacoplados, de maneira que a função de correlação total pode ser escrita como:

$$\left\langle \mathrm{e}^{i\theta(\vec{x})}\mathrm{e}^{-i\theta(0)} \right\rangle = \mathrm{e}^{-\left\langle (\theta_s(\vec{x}) - \theta_s(0))^2 \right\rangle/2} \left(\Lambda r\right)^{-\frac{1}{2\pi K}} = \left(\Lambda r\right)^{-\frac{1}{2\pi K_R}}, \qquad (A.17)$$

em que definimos a rigidez renormalizada K_R . O cálculo da função de correlação (A.16) é relativamente longo e requer o uso de algumas propriedades da função de Green (A.8) (os detalhes podem ser encontrados, por exemplo, em [9]); o resultado final obtido para a rigidez renormalizada é:

$$K_R^{-1} = K^{-1} - \pi^2 \int d^2 x \left\langle n\left(\vec{x}\right) n\left(0\right) \right\rangle \left|\vec{x}\right|^2 \,. \tag{A.18}$$

Portanto, resta calcular a função de correlação $\langle n(\vec{x}) n(0) \rangle$. Para baixas temperaturas, esta quantidade pode ser expandida em potências da fugacidade do sistema $y = e^{-E_c/k_BT}$, que mede, basicamente, a probabilidade de surgir um vórtice à temperatura T. Conforme discutido anteriormente, a baixas temperaturas, existe apenas um par ligado de cargas $\kappa = \pm 1$; assim,

usando a expressão da energia de interação entre vórtices (A.15), podemos calcular diretamente o valor médio $\langle \kappa_i \kappa_j \rangle$ em termos da fugacidade:

$$\langle \kappa_i \kappa_j \rangle = -2y^2 \left(\frac{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|}{a} \right)^{-2\pi K} \quad \Rightarrow \quad \langle n\left(\vec{x}\right) n\left(0\right) \rangle = \frac{\langle \kappa_i \kappa_j \rangle}{a^4} = -\frac{2y^2}{a^4} \left(\frac{r}{a}\right)^{-2\pi K} , \quad (A.19)$$

donde resulta, em ordem mais baixa de potências de y:

$$K_R^{-1} = K^{-1} + 4\pi^3 y^2 \int_a^\infty \frac{dr}{a} \left(\frac{r}{a}\right)^{3-2\pi K} .$$
 (A.20)

Esta equação indica o decréscimo da rigidez com o surgimento de novos pares, proporcional à fugacidade y. Fica claro que, para $K < 2/\pi$, a integral acima diverge quando $r \to \infty$, indicando a invalidade da expansão perturbativa. Para $K > 2/\pi$, a integral converge e a rigidez é renormalizada em um valor menor que o inicial.

A equação (A.20) pode ser analisada mais precisamente usando as técnicas do Grupo de Renormalização (GR). Para isso, consideremos uma granulação grossa do sistema original descrita pelo parâmetro $b = e^{\delta l}$, em que $\delta l \ll 1$. Quebrando a integral $\int_a^{\infty} = \int_a^{ae^{\delta l}} + \int_{ae^{\delta l}}^{\infty}$, podemos incorporar a parte não-singular ao termo K^{-1} , que passa a ser denotado por $(K')^{-1}$, de modo que:

$$K_R^{-1} = (K')^{-1} + 4\pi^3 y^2 \int_{ae^{\delta l}}^{\infty} \frac{dr}{a} \left(\frac{r}{a}\right)^{3-2\pi K} .$$
(A.21)

Agora, re-escalamos o *cutoff* ultravioleta do sistema, isto é, o tamanho do núcleo de um vórtice, $a \to a e^{-\delta l}$, e denotamos $y' = y e^{(2-\pi K)\delta l}$, obtendo:

$$K_R^{-1} = (K')^{-1} + 4\pi^3 (y')^2 \int_a^\infty \frac{dr}{a} \left(\frac{r}{a}\right)^{3-2\pi K'} .$$
 (A.22)

A troca $K \to K'$ no expoente do integrando não pode ser explicada por esta simples contagem de expoentes, mas é originada da contribuição de termos da ordem de y^4 na expansão perturbativa em potências da fugacidade [9]. Assim, o re-escalonamento preserva a forma da equação (A.20), gerando os parâmetros renormalizados $K' \in y'$. No limite do contínuo $\delta l \ll 1$, o comportamento destas quantidades em função do fluxo do GR é descrito pelas equações diferenciais:

$$\frac{dK^{-1}}{dl} = 4\pi^{3}y^{2}(l)$$

$$\frac{dy}{dl} = [2 - \pi K(l)]y(l) , \qquad (A.23)$$

em ordem quadrática na fugacidade. Fica evidente que a rigidez renormalizada pela excitação de pares de vórtices é dada por $K_R = K(l \to \infty)$; já o significado físico de $y(l \to \infty)$ está relacionado à presença de vórtices isolados. Para ver isso, consideremos um par ligado de vórtices localizado em alguma parte do sistema: os spins são distorcidos apenas na região localizada perto dos núcleos, formando uma configuração uniforme assintoticamente. Assim, conforme



Figura A.1. Fluxo do Grupo de Renormalização no espaço de parâmetros (K^{-1}, y) . A separatriz é denotada pela curva que termina no ponto fixo $(\pi/2, 0)$, enquanto as condições iniciais são descritas pela curva pontilhada (o ponto sobre ela indica uma condição inicial com $T > T_c$). Figura adaptada de [9].

aumentamos a granulação do sistema, deixamos de ser capazes de "ver" esta distorção dos spins, e terminamos por "enxergar" apenas a configuração uniforme no limite $l \to \infty$, como se aqueles vórtices não existissem. Logo, no caso de existirem apenas pares ligados de vórtices no sistema, $y (l \to \infty) = 0$; já na situação em que esta quantidade é diferente de zero, deve haver, necessariamente, vórtices livres, de modo que a configuração assintótica dos spins não é mais uniforme.

Analisando as equações diferenciais (A.23), notamos a existência do ponto fixo:

$$K^* = \frac{2}{\pi}$$

 $y^* = 0.$ (A.24)

O fluxo do GR é apresentado esquematicamente na figura A.1. Notamos a existência de uma separatriz no plano (K^{-1}, y) , que culmina no ponto crítico $(K^{-1} = \pi/2, y = 0)$ e separa duas regiões bastante distintas do espaço de parâmetros: para os pontos em que a fugacidade y é pequena e $K^{-1} < \pi/2$, o fluxo leva a uma rigidez renormalizada finita $K(l \to \infty) \neq 0$ e a $y(l \to \infty) = 0$, indicando a existência apenas de pares ligados no sistema. Nesta situação, a função de correlação (A.17) pode ser escrita como:

$$\left\langle \mathrm{e}^{i\theta(\vec{x})}\mathrm{e}^{-i\theta(0)} \right\rangle = (\Lambda r)^{-\frac{1}{2\pi K_R}} = (\Lambda r)^{-\eta(T)} , \qquad (A.25)$$

mostrando que o sistema ainda possui ordem de quase-longo alcance. Já para pontos acima da separatriz, em que y é grande ou $K^{-1} > \pi/2$, o fluxo do GR leva a uma rigidez renormalizada nula $K(l \to \infty) = 0$ e a $y(l \to \infty) \neq 0$, indicando a presença de vórtices livres no sistema e a perda da ordem de quase-longo alcance. Esta é a transição de Kosterlitz-Thouless para a fase líquida isotrópica; na linguagem do gás de Coulomb, diz-se que o sistema passou de um estado isolante para o estado de um plasma ionizado condutor. As condições iniciais $y(K) = e^{-E_c/k_BT} = e^{-E_cK/\rho_s}$ formam uma curva bem definida no plano (K^{-1}, y) (estamos denotando explicitamente a dependência de K com a temperatura através da quantidade $\rho_s, K = \rho_s/k_BT$), de modo que a temperatura crítica do sistema é obtida pelo cruzamento desta curva com a

separatriz. Os expoentes críticos que caracterizam a transição de Kosterlitz-Thouless podem ser obtidos através da resolução analítica das equações do fluxo (A.23) perto do ponto crítico. De acordo com a expressão (A.25), fica claro que, na iminência da transição, $\eta (T \to T_c^-) = 1/4$.

Os resultados acima delineados podem ser diretamente generalizados para o caso de uma fase nemática. A principal diferença é que, devido à simetria do diretor, o parâmetro de ordem passa a ser dado por $e^{2i\theta(\vec{x})}$ e os defeitos topológicos de menor energia correspondem a cargas fracionárias $|\kappa_i| = 1/2$. Na prática, basta multiplicar por 4 o expoente da função de correlação (A.25), bem como o valor que K assume no ponto crítico, $K^* = 8/\pi$. Portanto, a transição permanece caracterizada pelo mesmo expoente $\eta (T \to T_c^-) = 1/4$.

Apêndice B

Transformação de Hubbard-Stratonovich

Neste apêndice, vamos aplicar o procedimento conhecido como transformação de Hubbard-Stratonovich [124, 125] para obter o funcional de Ginzburg-Landau correspondente à Hamiltoniana microscópica de Heisenberg:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_i \vec{h}_i \cdot \vec{S}_i , \qquad (B.1)$$

em que J_{ij} é a matriz simétrica dos parâmetros de troca, \vec{S}_i é o spin de módulo unitário $S_i^2 = 1$ localizado no sítio $i \in \vec{h}_i$ é o campo magnético local. A abordagem que seguiremos é baseada em [36]. Nosso objetivo inicial é obter a energia livre \mathcal{F} da Hamiltoniana clássica acima; para isso, devemos calcular a função de partição:

$$Z = \operatorname{Tr}\left(e^{-\beta H}\right) = \mathcal{N}^{-1} \int \prod_{i} d\vec{S}_{i} \delta\left(S_{i}^{2} - 1\right) e^{\frac{\beta}{2} \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_{i} \cdot \vec{S}_{j} + \beta \sum_{i} \vec{h}_{i} \cdot \vec{S}_{i}}, \qquad (B.2)$$

com $\beta = 1/T$ e \mathcal{N} denotando um fator de normalização (estamos tomando $k_B = 1$, como fizemos durante o texto principal). O primeiro termo do expoente de Z pode ser escrito usando o resultado de integrais funcionais Gaussianas [9]:

$$\sqrt{\frac{1}{\det(A)}} e^{\frac{1}{2}\sum_{ij} y_i A_{ij}^{-1} y_j} = \int \prod_{i=1}^N \frac{dx_i}{(2\pi)^{N/2}} e^{-\frac{1}{2}\sum_{ij} x_i A_{ij} x_j + \sum_i x_i y_i}.$$
 (B.3)

Assim, introduzindo o campo auxiliar $\vec{\psi}_i$, ficamos com:

$$Z = \sqrt{\frac{(2\pi/\beta)^{N}}{\det(J)}} \mathcal{N}^{-1} \int \prod_{i} d\vec{\psi}_{i} \int \prod_{i} d\vec{S}_{i} \delta\left(S_{i}^{2}-1\right) e^{-\frac{\beta}{2}\sum_{ij} J_{ij}^{-1} \vec{\psi}_{i} \cdot \vec{\psi}_{j} + \beta \sum_{i} \vec{\psi}_{i} \cdot \vec{S}_{i} + \beta \sum_{i} \vec{h}_{i} \cdot \vec{S}_{i}}$$
$$Z = C \int \prod_{i} d\vec{\phi}_{i} e^{-\frac{\beta}{2}\sum_{ij} J_{ij}^{-1} (\vec{\phi}_{i} - \vec{h}_{i}) \cdot (\vec{\phi}_{j} - \vec{h}_{j})} \left[\int \prod_{i} d\vec{S}_{i} \delta\left(S_{i}^{2}-1\right) e^{\beta \sum_{i} \vec{\phi}_{i} \cdot \vec{S}_{i}} \right], \quad (B.4)$$

em que, na última passagem, fizemos a mudança de variáveis $\vec{\phi}_i = \vec{\psi}_i + \vec{h}_i$ e reunimos todas as constantes no fator C, que dará origem apenas a uma constante aditiva na expressão da energia livre e pode, portanto, ser ignorado. Assim, da definição da energia livre:

$$Z = \int \prod_{i} d\vec{\phi}_{i} e^{-\beta \mathcal{F}\left[\vec{\phi}_{i}, \vec{h}_{i}\right]}, \qquad (B.5)$$

obtemos:

$$\mathcal{F}\left[\vec{\phi_i}, \vec{h}_i\right] = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij}^{-1} \left(\vec{\phi_i} - \vec{h}_i\right) \cdot \left(\vec{\phi_j} - \vec{h}_j\right) - \frac{1}{\beta} \sum_i \ln\left[\int d\vec{S}\delta\left(\vec{S}^2 - 1\right) \mathrm{e}^{\beta\vec{\phi_i}\cdot\vec{S}}\right].$$
(B.6)

Vamos, inicialmente, particularizar a discussão para o modelo de Ising, no qual os spins possuem caráter escalar apenas. Fica claro que S só pode assumir os valores ± 1 , de modo que:

$$\int dS\delta \left(S^2 - 1\right) e^{\beta \phi_i S} = 2 \cosh \left(\beta \phi_i\right) ,. \tag{B.7}$$

Portanto, a energia livre assume a forma:

$$\mathcal{F}[\phi_i, h_i] = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij}^{-1} \left(\phi_i - h_i\right) \left(\phi_j - h_j\right) - \frac{1}{\beta} \sum_i \ln\left[2\cosh\left(\beta\phi_i\right)\right] \,. \tag{B.8}$$

O funcional de Ginzburg-Landau nada mais é do que uma expansão da energia livre em potências do valor de mínimo do campo auxiliar, o qual denotamos por $\bar{\phi}_i$. Ele é dado, implicitamente, por:

$$\left(\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\phi_i}\right)_{\bar{\phi}_i} = 0 \quad \Rightarrow \quad \bar{\phi}_i = h_i + \sum_j J_{ij} \tanh\left(\beta\bar{\phi}_j\right) \,. \tag{B.9}$$

Contudo, o parâmetro de ordem do sistema que possui significado físico é a magnetização adimensional local m_i :

$$m_i = -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial h_i} = \sum_j J_{ij}^{-1} \left(\bar{\phi}_j - h_j \right) = \tanh\left(\beta \bar{\phi}_i\right) \,. \tag{B.10}$$

Assim, devemos expressar a energia livre como função deste parâmetro de ordem, e não do campo auxiliar ϕ_i . Como a variável termodinâmica de $\mathcal{F}[\phi_i, h_i]$ é o campo magnético h_i , podemos fazer uma transformação de Legendre e definir um funcional apenas da magnetização:

$$\Gamma[m_i] = \mathcal{F}\left[\bar{\phi}_j(m_i), h_j(m_i)\right] + \sum_i h_i(m_j)m_i.$$
(B.11)

Resta, portanto, escrever explicitamente o campo magnético h_i e o campo auxiliar $\bar{\phi}_i$ como funções de m_i . Invertendo a equação (B.10) e combinando-a com (B.9), obtemos:

$$\bar{\phi}_i = \frac{1}{2\beta} \ln\left(\frac{1+m_i}{1-m_i}\right)$$

$$h_i = \frac{1}{\beta} \tanh^{-1}(m_i) - \sum_j J_{ij} m_j.$$
(B.12)

É interessante notar que a última dessas expressões nada mais é que a conhecida equação de Weiss do ferromagnetismo [9]:

146

$$m_i = \tanh\left(\beta h_i + \beta \sum_j J_{ij} m_j\right).$$
 (B.13)

Agora, substituindo as relações inversas (B.12) na expressão da energia livre (B.8) e depois no funcional (B.11), obtemos, após um cálculo direto:

$$\Gamma[m_i] = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} m_i m_j + \frac{T}{2} \sum_i \left\{ (1+m_i) \ln (1+m_i) + (1-m_i) \ln (1-m_i) \right\} - T \sum_i \ln 2.$$
(B.14)

O último termo é apenas uma constante aditiva que não depende da magnetização. Como queremos uma expansão em potências do parâmetro de ordem m_i , o segundo termo pode ser expandido em série de Taylor, fornecendo, até ordem quártica:

$$\Gamma[m_i] = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} m_i m_j + T \sum_i \left(\frac{m_i^2}{2} + \frac{m_i^4}{12}\right) .$$
(B.15)

O primeiro termo depende da simetria da rede subjacente e da forma da interação de troca. Considerando apenas interações entre os primeiros vizinhos e passando para o limite contínuo, podemos escrever:

$$m_j \to m\left(\vec{x} + \vec{\delta}^{(\alpha)}\right) = m\left(\vec{x}\right) + \delta_i^{(\alpha)} \nabla_i m\left(\vec{x}\right) + \frac{1}{2} \delta_i^{(\alpha)} \delta_j^{(\alpha)} \nabla_i \nabla_j m\left(\vec{x}\right) , \qquad (B.16)$$

em que subentende-se que índices repetidos são somados e os versores $\vec{\delta}^{(\alpha)}$ apontam nas direções dos primeiros vizinhos $\alpha = 1, ..., z$. Passando as somas para o limite contínuo, chegamos à expressão:

$$\Gamma[m(\vec{x})] = \frac{1}{V} \int d^d x \left\{ -\frac{zJ}{2} m^2(\vec{x}) + \frac{T}{2} m^2(\vec{x}) + \frac{T}{12} m^4(\vec{x}) - \frac{J}{2} m(\vec{x}) \sum_{\alpha} \left[\delta_i^{(\alpha)} \nabla_i m(\vec{x}) + \frac{1}{2} \delta_i^{(\alpha)} \delta_j^{(\alpha)} \nabla_i \nabla_j m(\vec{x}) \right] \right\}, \quad (B.17)$$

em que V denota o volume da célula unitária. No caso de uma rede cúbica de parâmetro de rede a, obtemos:

$$\Gamma[m(\vec{x})] = \int d^3x \left\{ -\frac{J}{2a}m(\vec{x})\nabla^2 m(\vec{x}) + \left(\frac{T-T_c}{2a^3}\right)m^2(\vec{x}) + \frac{T}{12a^3}m^4(\vec{x}) \right\},$$
(B.18)

com $T_c = zJ$. Como a expansão é válida próximo à temperatura crítica, podemos tomar $T = T_c$ no termo quártico. Integrando o primeiro termo por partes e desprezando o termo de superfície subseqüente, podemos usar (B.11) para voltar à expressão da energia livre, donde resulta a Hamiltoniana efetiva de Ginzburg-Landau do modelo de Ising:

$$\beta \mathcal{F}[m,h] = \int d^3x \left\{ \frac{J}{2aT} \left| \vec{\nabla} m\left(\vec{x} \right) \right|^2 + \left(\frac{T - T_c}{2a^3T} \right) m^2 + \frac{T_c}{12a^3T} m^4 - \frac{1}{a^3T} hm \right\}, \qquad (B.19)$$

em acordo com a equação (2.3) do texto principal.

Vamos agora considerar a equação (B.6) no caso de spins planares sujeitos ao modelo XY (ou XZ, como denominamos durante o texto principal). A integral sobre as variáveis de spin pode ser feita em coordenadas polares, resultando em uma função de Bessel modificada de primeira espécie:

$$\int d\vec{S}\delta\left(\vec{S}^2 - 1\right) e^{\beta\vec{\phi}_i \cdot \vec{S}} = 2 \int_0^\pi d\theta \cosh\left(\beta \left|\vec{\phi}_i\right| \cos\theta\right) = 2\pi I_0\left(\beta \left|\vec{\phi}_i\right|\right) \,. \tag{B.20}$$

Desse modo, a menos de constantes aditivas, a energia livre passa a ser dada por:

$$\mathcal{F}\left[\vec{\phi_i}, \vec{h}_i\right] = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij}^{-1} \left(\vec{\phi_i} - \vec{h}_i\right) \cdot \left(\vec{\phi_j} - \vec{h}_j\right) - \frac{1}{\beta} \sum_i \ln\left[I_0\left(\beta \left|\vec{\phi_i}\right|\right)\right]. \tag{B.21}$$

Na seqüência, repetimos o mesmo procedimento adotado no caso do modelo de Ising. O valor do campo auxiliar que minimiza a energia livre é dado implicitamente pela relação (não estamos usando a notação $\vec{\phi}$ para denotar este campo a fim de evitarmos expressões enfadonhas):

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \vec{\phi_i}} = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{\phi_i} = \vec{h}_i + \sum_j J_{ij} \frac{I_1\left(\beta \left| \vec{\phi_j} \right| \right)}{I_0\left(\beta \left| \vec{\phi_j} \right| \right)} \frac{\vec{\phi_j}}{\left| \vec{\phi_j} \right|}. \tag{B.22}$$

Já a magnetização relaciona-se com o campo auxiliar através de:

$$\vec{m}_{i} = -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \vec{h}_{i}} = \frac{I_{1}\left(\beta \left|\vec{\phi}_{i}\right|\right)}{I_{0}\left(\beta \left|\vec{\phi}_{i}\right|\right)} \frac{\vec{\phi}_{i}}{\left|\vec{\phi}_{i}\right|}.$$
(B.23)

Combinando as duas equações anteriores, podemos escrever a magnetização apenas como função do campo magnético:

$$\vec{\phi}_{i} = \vec{h}_{i} + \sum_{j} J_{ij} \vec{m}_{j}$$

$$\vec{m}_{i} = \frac{I_{1} \left(\beta \left| \vec{h}_{i} + \sum_{j} J_{ij} \vec{m}_{j} \right| \right)}{I_{0} \left(\beta \left| \vec{h}_{i} + \sum_{j} J_{ij} \vec{m}_{j} \right| \right)} \frac{\vec{h}_{i} + \sum_{j} J_{ij} \vec{m}_{j}}{\left| \vec{h}_{i} + \sum_{j} J_{ij} \vec{m}_{j} \right|}, \qquad (B.24)$$

resultando em uma espécie de "equação de Weiss" do modelo XY. Novamente, definimos o funcional $\Gamma[\vec{m}_i]$ através da transformada de Legendre:

$$\Gamma\left[\vec{m}_{i}\right] = \mathcal{F}\left[\vec{\phi}\left(\vec{m}_{i}\right), \vec{h}\left(\vec{m}_{i}\right)\right] + \sum_{i} \vec{h}_{i}\left(\vec{m}_{i}\right) \cdot \vec{m}_{i}.$$
(B.25)

Usando a primeira equação de (B.24), eliminamos a variável \vec{h}_i do funcional $\Gamma[\vec{m}_i]$, resultando em:

$$\Gamma\left[\vec{m}_{i}\right] = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \vec{m}_{i} \cdot \vec{m}_{j} + \frac{1}{\beta} \sum_{i} \left\{ \beta \vec{\phi}_{i} \cdot \vec{m}_{i} - \ln\left[I_{0}\left(\beta \left|\vec{\phi}_{i}\right|\right)\right] \right\} .$$
(B.26)

Ao contrário do caso do modelo de Ising, não é possível inverter explicitamente a equação (B.23), de modo a escrevermos $\vec{\phi_i}$ como função de $\vec{m_i}$. Contudo, como estamos interessados em expandir a energia livre em série de potências de $\vec{m_i}$, podemos expandir o lado direito de (B.23) em série de Taylor e, depois, inverter a série para escrever $\vec{\phi_i}$ em potências da magnetização. O cálculo é direto; o primeiro resultado de que necessitamos é:

$$\beta \vec{\phi}_i \cdot \vec{m}_i = \frac{\left(\beta \left| \vec{\phi}_i \right| \right)^2}{2} - \frac{\left(\beta \left| \vec{\phi}_i \right| \right)^4}{16} + \mathcal{O}\left(\left(\beta \left| \vec{\phi}_i \right| \right)^6 \right) , \qquad (B.27)$$

e o segundo é a expansão em série propriamente dita:

$$\beta \left| \vec{\phi}_i \right| = 2 \left| \vec{m}_i \right| + \left| \vec{m}_i \right|^3 + \frac{5}{6} \left| \vec{m}_i \right|^5 + \mathcal{O} \left(\left| \vec{m}_i \right|^7 \right) \,. \tag{B.28}$$

Assim, usando a expansão da função de Bessel modificada para pequenos argumentos, ficamos com:

$$\Gamma\left[\vec{m}_{i}\right] = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \vec{m}_{i} \cdot \vec{m}_{j} + \frac{1}{\beta} \sum_{i} \left[2m_{i}^{2} + \frac{5}{4}m_{i}^{4}\right], \qquad (B.29)$$

em ordem quártica na magnetização. O primeiro termo da equação acima é semelhante ao do caso do modelo de Ising. Assim, considerando uma rede cúbica com interações entre primeiros vizinhos somente, chegamos à seguinte expressão para a Hamiltoniana efetiva de Ginzburg-Landau do modelo XY:

$$\beta \mathcal{F}\left[\vec{m},\vec{h}\right] = \int d^3x \left\{ \frac{J}{2aT} \left| \vec{\nabla} \vec{m} \left(\vec{x} \right) \right|^2 + \frac{2\left(T - T_c\right)}{a^3T} \left(\vec{m} \cdot \vec{m} \right) + \frac{5T_c}{4a^3T} \left(\vec{m} \cdot \vec{m} \right)^2 - \frac{1}{a^3T} \vec{h} \cdot \vec{m} \right\},\tag{B.30}$$

com $T_c = \frac{Jz}{4}$, em acordo com a expressão (2.60) do texto principal.

Apêndice C

Paredes de domínios de Néel em blocos ferromagnéticos dipolares

Neste apêndice, mostramos detalhadamente como podemos obter, através do método de minimização da energia, o valor da largura das paredes de domínio do bloco ferromagnético dipolar com largura e espessura finitas, apresentado durante o capítulo 2. O modelo fenomenológico para a magnetização correspondente aos domínios de Néel foi proposto na seção 2.6:

$$M_x(x) = M_0 \sum_{i=1}^{N-1} e^{-\frac{(x-di/N)^2}{2\sigma^2}}$$
$$M_z(x) = M_0 \sum_{i=1}^N \frac{(-1)^{i-1}}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left[-\frac{x-d(i-1)/N}{\sqrt{2}\sigma} \right] - \operatorname{erfc} \left[-\frac{x-di/N}{\sqrt{2}\sigma} \right] \right\}, \quad (C.1)$$

com $M_0^2 = M_x^2 + M_z^2$. Conforme explicado naquela seção, na ausência de campos magnéticos externos, há três termos contribuindo para a energia total da configuração acima. Considerando uma rede cúbica de parâmetro de rede a, de modo que $M_0 = g\mu_B/a^3$, podemos escrever o termo devido à interação de troca como:

$$E_{\text{troca}} = \frac{J}{2a} \int d^3x \left[\left| \vec{\nabla} m_x \left(\vec{x} \right) \right|^2 + \left| \vec{\nabla} m_z \left(\vec{x} \right) \right|^2 \right] \,, \tag{C.2}$$

Novamente, definimos a notação $\vec{m} = \vec{M}/M_0$. Substituindo (C.1), obtemos a densidade de energia de troca:

$$\frac{E_{\rm troca}}{V} = \frac{2J}{a^3} \left[\frac{2N + \pi(N-1)}{8\sqrt{\pi}(d/a)(\sigma/a)} \right] \,.$$
(C.3)

A contribuição devido à interação dipolar é obtida através da substituição de (C.1) na fórmula (2.16), com $\rho = -\vec{\nabla} \cdot \vec{M}$; o resultado final é:

$$\frac{E_{\text{dipolar}}}{V} = \frac{2}{a^3} \left(\frac{g^2 \mu_B^2}{a^3}\right) \left[\left(\frac{\sigma}{d}\right)^2 \epsilon_x \left(\frac{\sigma}{d}, N, p\right) + \epsilon_z \left(\frac{\sigma}{d}, N, p\right) \right], \quad (C.4)$$

em que p = d/D denota a razão de aspecto do bloco e:

Apêndice C. Paredes de domínios de Néel em blocos ferromagnéticos dipolares

$$\epsilon_{x} \left(\frac{\sigma}{d}, N, p\right) = 2\pi p \int_{0}^{\infty} \frac{e^{-u^{2} \left(\frac{\sigma}{d}\right)^{2}}}{u} \left(\frac{u}{p} + e^{-u/p} - 1\right) \\ \left[1 + \frac{\sin^{2} u/2}{\sin^{2} u/2N} - 2\cos\left(\frac{u(N-1)}{2N}\right) \frac{\sin u/2}{\sin u/2N}\right] du \\ \epsilon_{z} \left(\frac{\sigma}{d}, N, p\right) = 4p \int_{0}^{\infty} e^{-u^{2} \left(\frac{\sigma}{d}\right)^{2}} \frac{e^{-u/2p}}{u^{3}} \sinh\left(\frac{u}{2p}\right) \tan^{2}\left(\frac{u}{2N}\right) \left[1 - (-1)^{N} \cos u\right] du (C.5)$$

A contribuição da anisotropia cristalina para a energia total é expressa por:

$$E_{\rm cristalina} = -\Delta K \int d^3 x m_x^2 \,, \tag{C.6}$$

Assim, substituindo a configuração descrita por (C.1), obtemos:

$$\frac{E_{\text{cristalina}}}{V} = -2\Delta K \frac{(N-1)\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{\sigma}{d}\right) \,. \tag{C.7}$$

O valor da largura da parede de domínio σ é determinado minimizando-se a energia total, dada pela soma de (C.3), (C.4) e (C.7). Efetuando este cálculo e usando que $\sigma \ll d$, concluímos que seu valor pode ser obtido auto-consistentemente através da equação:

$$\frac{\sigma}{a} = \zeta \left(\frac{J}{g^2 \mu_B^2/a^3}\right)^{1/3} \left(\frac{2N + \pi(N-1)}{64\sqrt{\pi} \left(a/d\right)\epsilon_x \left(\frac{\sigma}{d}, N, p\right)}\right)^{1/3},\tag{C.8}$$

em que ζ é solução da equação cúbica:

$$\zeta^3 - 3\lambda\zeta^2 - 4 = 0, \qquad (C.9)$$

e λ é uma constante adimensional cujo valor depende, basicamente, das intensidades relativas entre os três tipos de interações:

$$\lambda = \left[\frac{\left(\Delta K a^3\right)^3}{J\left(g^2 \mu_B^2 / a^3\right)^2}\right]^{1/3} \left[\frac{2(N-1)^3 \pi^2}{27\left(a\epsilon_x\left(0, N, p\right) / d\right)^2\left(2N + \pi(N-1)\right)}\right]^{1/3}.$$
 (C.10)

A equação cúbica (C.9) admite uma única solução real, que está apresentada na figura C.1 em função da constante λ . Analiticamente, ela é dada por:

$$\zeta = \begin{cases} \lambda + \frac{\lambda^2}{\left(1 + \sqrt{1 + \lambda^3}\right)^{2/3}} + \left(1 + \sqrt{1 + \lambda^3}\right)^{2/3}, & \text{para } \lambda \ge 0\\ \lambda + \frac{\lambda^2}{\left(1 - \sqrt{1 + \lambda^3}\right)^{2/3}} + \left(1 - \sqrt{1 + \lambda^3}\right)^{2/3}, & \text{para } -1 \le \lambda \le 0\\ \lambda - 2\lambda \cos\left[\frac{\arg\left(2 + \lambda^3 - 2\sqrt{\lambda^3 + 1}\right)}{3}\right], & \text{para } \lambda < -1. \end{cases}$$
(C.11)

É interessante comparar estes resultados com o modelo bem conhecido das paredes de domínio de Landau-Lifshitz, referente a um bloco infinito [53]. Neste caso, os domínios só podem ser formados se o eixo fácil do material apontar na direção \hat{z} , isto é, se $\Delta K < 0$. De acordo com o gráfico da figura C.1, notamos que, para o bloco finito, domínios de Néel com paredes mais



Figura C.1. Solução real ζ da equação cúbica (C.9) em função do parâmetro λ definido em (C.10).

largas podem ser estabelecidos mesmo que $\Delta K > 0$, pois a interação dipolar, fundamentalmente relevante para um sistema finito, "compensa" a anisotropia cristalina desfavorável. No limite de um bloco infinito, o presente modelo fornece um valor para a largura da parede que é apenas 6% maior que o obtido através da abordagem de Landau-Lifshitz:

$$\left(\frac{\sigma}{a}\right) = 1.06\sqrt{-\frac{J}{2a^3\Delta K}},\tag{C.12}$$

Para o caso dos terraços ferromagnéticos dos filmes finos de MnAs crescidos sobre GaAs, seguindo o que foi discutido durante a seção 2.6, tomamos os mesmos parâmetros a = 4 Å, g = 4,5, J = 4,5 meV, D = 130 nm, $\Delta K = 0,4 \cdot 10^6 \text{ erg/cm}^3$ e N = 3. Assim, usando a solução da equação cúbica para $\lambda > 0$, dada em (C.11), além da relação auto-consistente (C.8), obtemos o valor $\sigma \approx 4a = 16$ Å. Trata-se, portanto, de uma interessante previsão deste modelo fenomenológico, passível de ser verificada experimentalmente.

Apêndice D

Percolação e redes de resistores aleatórios

Neste apêndice, vamos aprofundar a investigação da rede de resistores aleatórios no limite de contraste infinito - isto é, quando uma das condutividades microscópicas é zero e a outra assume um valor finito. Para esta situação, as propriedades de transporte da rede estão intimamente relacionadas às suas propriedades percolativas. Conforme mostraremos, trata-se de um exemplo bastante claro de sistema no qual a condutividade global não escala linearmente com o parâmetro de ordem subjacente.

Em uma rede de resistores aleatórios (RRN, do inglês random resistor network), podem ser encontrados dois tipos de resistores microscópicos nas ligações entre sítios vizinhos: um de condutividade σ_1 , ao qual está associado uma probabilidade p, e outro de condutividade σ_2 , com probabilidade 1 - p. No limite de contraste infinito $(g \to \infty)$, tem-se σ_1 finito e $\sigma_2 = 0$. Neste caso, fica claro que a rede só será capaz de conduzir corrente quando houver um aglomerado percolativo de ligações condutoras abrangendo o sistema. Da teoria de percolação [95], isto ocorre para concentrações de ligações condutoras superiores a um certo limiar denotado por p_c , isto é, $p > p_c$, como ilustra a figura D.1.

Apesar de p_c depender da simetria da rede em questão, as propriedades gerais dos sistemas percolativos são universais - ou seja, dependem apenas da sua dimensionalidade, a exemplo do que ocorre para os expoentes críticos das transições contínuas. De fato, a grandeza que representa o papel de parâmetro de ordem da percolação é a densidade P de sítios do aglomerado percolativo infinito - isto é, o aglomerado de ligações condutoras que abrange todo o sistema. É evidente que, para $p \leq p_c$, esta densidade é nula, já que não existe um aglomerado percolativo,



Figura D.1. Percolação de sítios em uma rede quadrada, em que sítios ocupados (denotados por um círculo cheio) são encontrados com uma probabilidade p. Apenas para $p \gtrsim 0.59$ forma-se um aglomerado percolativo de sítios ocupados (denotado por círculos abertos) abrangendo todo o sistema. Adaptada de [126].

enquanto que, para $p > p_c$, ela é diferente de zero. Assim, como trata-se de uma grandeza que varia continuamente com a concentração de ligações condutoras p [95], ela deve apresentar uma não-analiticidade em p_c , caracterizada pelo expoente β :

$$P(p) \sim \left(p - p_c\right)^{\beta} \,. \tag{D.1}$$

Uma outra grandeza de extrema importância na teoria de percolação é denotada por n_s e refere-se ao número de aglomerados finitos condutores que possuem s sítios, dividido pelo total de sítios da rede. Ela está relacionada à densidade de sítios do aglomerado infinito P através da expressão:

$$P(p) = p - \sum_{s} sn_s \,. \tag{D.2}$$

A partir de n_s , podemos definir o número médio S de sítios pertencentes a um aglomerado finito qualquer; no limiar da percolação p_c , esta quantidade diverge com o expoente γ :

$$S(p) \sim |p - p_c|^{-\gamma} , \qquad (D.3)$$

em estreita analogia com a susceptibilidade de sistemas críticos. Estes dois expoentes podem ser obtidos a partir de uma relação de escala bastante geral que descreve n_s :

$$n_s(p) = s^{-\tau} f[(p - p_c) s^{\sigma}],$$
 (D.4)

em que f(z) é uma função de escala que apresenta os seguintes comportamentos limites:

$$f(z) \sim \begin{cases} \text{constante} &, \text{ para } |z| \ll 1\\ e^{-z} &, \text{ para } |z| \gg 1. \end{cases}$$
(D.5)

Assim, tem-se um comportamento de *crossover* entre criticalidade e não-criticalidade, determinado por um aglomerado finito crítico contendo s_c sítios. Próximo ao limiar da percolação, esta quantidade diverge da seguinte forma:

$$s_c \sim |p - p_c|^{-1/\sigma}$$
 . (D.6)

Portanto, aglomerados que contenham um número de sítios $s \gg s_c$ são encontrados no sistema muito raramente, uma vez que n_s cai exponencialmente com o número de sítios. Já para aglomerados com $s \ll s_c$, n_s decai apenas polinomialmente com o número de sítios s, indicando que estes tipos de aglomerados são mais comumente encontrados. Logo, a divergência de s_c no limiar percolativo p_c pode ser interpretada como um indicador da formação de um aglomerado infinito, que abrange todo o sistema. É comum referir-se a s_c , o número de sítios de um aglomerado crítico, como a "massa" do aglomerado. Através da relação de escala (D.4), podemos ainda expressar os expoentes $\gamma \in \beta$ em função dos expoentes $\tau \in \sigma$:

$$\gamma = \frac{3-\tau}{\sigma}$$

$$\beta = \frac{\tau-2}{\sigma}.$$
(D.7)

Assim como no caso dos sistemas que sofrem transições de segunda ordem, a relação de escala (D.4) pode ser obtida a partir de uma abordagem via Grupo de Renormalização. Mantendo esta analogia entre percolação e fenômenos críticos em mente, define-se a função de correlação percolativa G(r) como a probabilidade de que, dado um sítio em um certo aglomerado finito, seja encontrado, a uma distância r dele, um outro sítio pertencente ao mesmo aglomerado. É possível demonstrar que esta função de correlação decai exponencialmente com r, definindo um comprimento de correlação ξ . Além disso, mostra-se ainda que ξ equivale ao raio médio dos aglomerados críticos; portanto, como s_c diverge no limiar percolativo, ξ também o faz:

$$\xi \sim \left| p - p_c \right|^{-\nu} \,. \tag{D.8}$$

Esta escala de comprimento tem um papel bastante importante na caracterização topológica do aglomerado percolativo infinito. Para $p > p_c$, tanto a "massa" s_c quanto o raio ξ dos aglomerados críticos permanecem finitos. Assim, o aglomerado infinito que se forma nestas concentrações deve possuir poros de comprimentos da ordem de ξ , pois dentro deles podem estar encerrados aglomerados finitos críticos, como ilustra a figura D.2. A natureza porosa do aglomerado infinito fica mais evidenciada quando estudamos como a massa do aglomerado crítico varia com o seu comprimento no limiar da percolação, $p = p_c$. O que se obtém, nesta situação, é um comportamento fractal $s_c \propto \xi^{d_f}$, com:

$$d_f = d - \frac{\beta}{\nu} < d. \tag{D.9}$$

Assim, a dimensão fractal d_f indica que, em $p = p_c$, o aglomerado infinito incipiente possui um caráter ramificado e auto-similar. No caso de sistemas finitos, este comportamento fractal é estendido para um intervalo de concentrações próximas do limiar p_c , já que, nesta situação, o comprimento de correlação, mesmo finito, será ainda muito maior que a extensão da rede.

No limite termodinâmico (isto é, sistema infinitos), o aglomerado infinito passa a ter um caráter homogêneo para qualquer concentração maior que p_c , desde que observado em escalas de comprimento $L \gg \xi$. Entretanto, conforme explicado anteriormente, ele ainda apresenta poros e ramificações de comprimento típico ξ . Assim, caso ele seja observado em escalas $L \ll \xi$, o aglomerado infinito volta a ter um aspecto ramificado e fractal. Portanto, para $p > p_c$, é útil dividir o sistema em caixas de tamanho ξ , já que, dentro de cada caixa, a porção do aglomerado infinito englobada comportar-se-á como o aglomerado infinito incipiente no limiar percolativo $p = p_c$.

Além da dimensão fractal que o caracteriza, o aglomerado incipiente possui uma outra propriedade topológica fundamental para o entendimento do comportamento da condutividade: a multi-fractalidade. Conforme explicado, em $p = p_c$, o aglomerado infinito possui diversas ramificações. O que se observa é que várias delas são cadeias de ligações condutoras que terminam em



Figura D.2. Caráter poroso do aglomerado infinito: seus buracos, de tamanho típico ξ , encerram aglomerados finitos críticos. Estamos considerando, nesta figura, o limite contínuo, em que as particularidades da rede subjacente são imperceptíveis. Adaptada de [127].



Figura D.3. Aglomerado incipiente conectando duas extremidades opostas de um sistema finito: da espinha dorsal, representada pela linha cheia, ramificam-se várias cadeias sem saída que não conduzem corrente, representadas por linhas pontilhadas. Adaptada de [126].

um ponto, como ruas sem saída, conforme ilustra a figura D.3. No que concerne a condutividade da rede, estas cadeias, apesar de fazerem parte do aglomerado infinito, não transportam corrente elétrica. Assim, é útil encarar o aglomerado como constituído de uma espinha dorsal (do inglês *backbone*) da qual se ramificam cadeias sem saída. Mostra-se que a dependência da "massa" (número de sítios) da espinha M_B em relação à dimensão linear do sistema L também segue um comportamento fractal, $M_B \propto L^{d_b}$, com $d_b < d_f$. Desse modo, a razão entre a massa da espinha dorsal e a massa do próprio aglomerado, $M_B/M_c \sim L^{d_b-d_f}$, tende a zero para sistemas infinitos, indicando que a maior parte do aglomerado incipiente é constituída por cadeias de ligações condutoras sem saída. Este fato indica que a condutividade não pode ser linearmente proporcional ao número de sítios do aglomerado infinito. Portanto, perto do limiar percolativo, o comportamento não-analítico da condutividade é descrito por um expoente $\mu \neq \beta$:

$$\Sigma \sim (p - p_c)^{\mu} . \tag{D.10}$$



Figura D.4. Modelo de ligações-nós-bolhas (LNB): pontos distantes ξ um do outro são conectados por cadeias unicamente conectadas de ligações condutoras, caracterizadas por um comprimento \tilde{L} . Adaptada de [127].

Uma modelagem simples que tenta descrever o expoente da condutividade μ é conhecida como modelo de ligações-nós-bolhas (LNB, do inglês *links-nodes-blobs*; ver referências do capítulo 5 de [95]). Nesta abordagem, o aglomerado infinito no regime $p > p_c$ é dividido em caixas de comprimento ξ , implicando que, dentro de cada caixa, ele se comporta como o aglomerado incipiente em $p = p_c$. Como este é constituído, na sua maior parte, por cadeias sem saída, o modelo LNB assume que existe apenas uma cadeia unicamente conectada (do inglês *singly-connected chain*) de ligações condutoras entre as extremidades das caixas. Assim, tem-se uma série de nós separados por uma distância ξ e conectados por segmentos unidimensionais condutores de comprimento \tilde{L} , de acordo com o que está apresentado na figura D.4. Como a espinha dorsal do aglomerado incipiente pode ser bastante retorcida, tem-se que $\tilde{L} > \xi$, de modo que sua extensão é caracterizada por um outro expoente ζ :

$$\tilde{L} \sim (p - p_c)^{-\zeta} . \tag{D.11}$$

No contexto do modelo LNB, podemos obter diretamente a condutividade da RRN. Para isso, encaramos a cadeia unicamente conectada de comprimento \tilde{L} como uma seqüência de resistores acoplados em série. Assim, sua resistência R_0 deve crescer linearmente com \tilde{L} , de modo que $R_0 \sim (p - p_c)^{-\zeta}$. Considerando um campo elétrico constante E aplicado entre os nós, a diferença de potencial entre dois deles é dada por $E\xi$. Portanto, da lei de Ohm, a corrente que passa pela cadeia unicamente conectada é $I = E\xi/R_0$. Já a densidade de corrente nada mais é que a corrente dividida pela área transversal da caixa, $J = I/\xi^{d-1}$. Portanto, a condutividade é dada por:

$$\Sigma = \frac{J}{E} = \frac{I}{E\xi^{d-1}} \sim (p - p_c)^{(d-2)\nu + \zeta} \quad \Rightarrow \quad \mu = (d-2)\nu + \zeta. \tag{D.12}$$

Logo, fica evidente que a condutividade não é linearmente proporcional ao parâmetro de ordem, de modo que $\mu \neq \beta$. É possível mostrar que, da definição de \tilde{L} dada anteriormente, segue-se necessariamente que $\zeta = 1$ [127]. Já no que concerne os expoentes críticos percolativos (β, ν, γ) , eles podem ser obtidos exatamente para as dimensionalidades d = 1 e d = 2, além do caso da rede de Bethe, que, efetivamente, equivale a uma abordagem de campo médio, em que



Figura D.5. Ilustração de uma porção do aglomerado incipiente condutor, com ramificações em forma de cadeias sem saída e bolhas. Estas últimas representam acoplamentos em paralelo de ligações condutoras, como os que surgem na simulação apresentada na figura D.3. Adaptada de [127].

 $d \to \infty$. Para a rede tridimensional, outros métodos são necessários, como simulações numéricas ou expansões perturbativas em $\epsilon = 6-d$, uma vez que 6 é a dimensão crítica superior do problema percolativo¹. De qualquer modo, aplicando a fórmula (D.12) para uma RRN bidimensional, obtemos $\mu = \zeta = 1$, que é diferente do expoente do parâmetro de ordem $\beta = 5/36$. Contudo, o expoente ν assume o valor 4/3, de modo que $\nu > \zeta$, implicando que a distância entre os nós cresce mais rapidamente que o comprimento da cadeia unicamente conectada que os une. Logo, tem-se uma aparente inconsistência no modelo.

O que ocorre é que, até agora, não levamos em conta o papel de cadeias condutoras multiplamente conectadas - as chamadas bolhas - na topologia da espinha dorsal do aglomerado incipiente. Estas bolhas, representadas na figura D.5, são formadas por ligações condutoras acopladas em paralelo, que contribuem de maneira diferente para o transporte da corrente elétrica quando comparadas às cadeias de resistores em série. Além disso, demonstra-se que a massa das cadeias unicamente conectada M_{sc} varia com o comprimento linear do sistema de acordo com uma lei fractal $M_{sc} \propto L^{d_{sc}}$, com $d_{sc} < d_b < d_f$. Portanto, não só o aglomerado incipiente tem mais sítios pertencentes a cadeias sem saída do que à espinha dorsal, como também a espinha dorsal possui mais sítios pertencentes às bolhas do que às cadeias condutoras unicamente conectada.

Logo, o segmento de ligações condutoras que une os nós no modelo LNB não é formado apenas por cadeias unicamente conectada, mas, principalmente, por bolhas redundantes. Portanto, o expoente ζ que aparece em (D.12) não pode ser o expoente associado às cadeias simplesmente conexas, $\tilde{L}_{sc} \sim (p - p_c)^{-1}$, mas deve conter também a contribuição das bolhas. Dessa maneira, a aparente inconsistência apontada anteriormente é removida.

Apesar de fornecer um cenário pictórico bastante claro para descrever a condutividade de uma RRN no limiar percolativo, o modelo LNB não permite um cálculo direto do expoente μ . Para obtê-lo, pode-se apelar, novamente, para simulações numéricas ou métodos envolvendo o Grupo de Renormalização. No contexto da teoria ϕ^3 resultante, a relação (D.12) é verificada para qualquer dimensionalidade, e ζ assume o significado de um expoente de *crossover*. Realizando uma expansão perturbativa em potências de $\epsilon = 6 - d$, obtém-se $\zeta = 1 + \epsilon/42 + 4\epsilon^2/3087$ [128],

¹ O problema de uma rede percolativa pode ser mapeado em um modelo de Potts de s estados no limite $s \rightarrow 1$, donde resulta uma teoria de campo do tipo ϕ^3 [100].

do qual pode-se extrapolar o valor $\zeta \approx 1, 12$ para redes bidimensionais, a ser comparado com o valor $\mu = \zeta \approx 1, 3$ determinado por simulações numéricas [95].

Portanto, o modelo LNB deixa claro que o expoente da condutividade não pode ser determinado exclusivamente a partir dos expoentes percolativos estáticos. Isto fica ainda mais evidente considerando a dimensão de fracton (ou dimensão espectral) \tilde{d} da rede percolativa [95]. Em uma rede regular - isto é, não-fractal - os modos excitados por oscilações elásticas da rede são os fônons, caracterizados pela relação de dispersão $\omega = ck \propto \lambda^{-1}$. Já para o caso de redes diluídas fractais, as excitações equivalente são chamadas de fractons e são caracterizadas por um comprimento típico λ_f que obedece a relação $\lambda_f^{-d_f} \propto \omega^{\tilde{d}}$, em que d_f é a dimensão fractal da rede. O expoente da condutividade pode ser escrito como função deste expoente dinâmico percolativo e dos dois expoentes estáticos independentes, através da expressão:

$$\tilde{d} = \frac{2\left(d\nu - \beta\right)}{\mu - \beta + 2\nu}.\tag{D.13}$$

Para finalizar a discussão sobre percolação e redes de resistores, vale mencionar o caso da rede bidimensional de resistores correlacionados segundo o modelo de Ising no limite de contraste infinito. Conforme apresentado no texto principal, o expoente da condutividade vale $\mu \approx 0, 2$, resultado obtido primeiramente em [102]. Este valor é significativamente menor que o correspondente à RRN, $\mu \approx 1, 3$. No caso da rede correlacionada, a transição percolativa subjacente corresponde à formação, no ponto crítico de Ising, de um aglomerado infinito de spins que apontam na mesma direção. Contudo, os expoentes críticos que descrevem o comportamento deste aglomerado não pertencem à classe de universalidade de Ising, como demonstrado exatamente em [129]. Assim, o expoente $\mu \approx 0, 2$ obtido numericamente reflete as propriedades dinâmicas destes aglomerados fractais de spins apontando na mesma direção.