

Orden orientacional en sistemas con interacciones competitivas

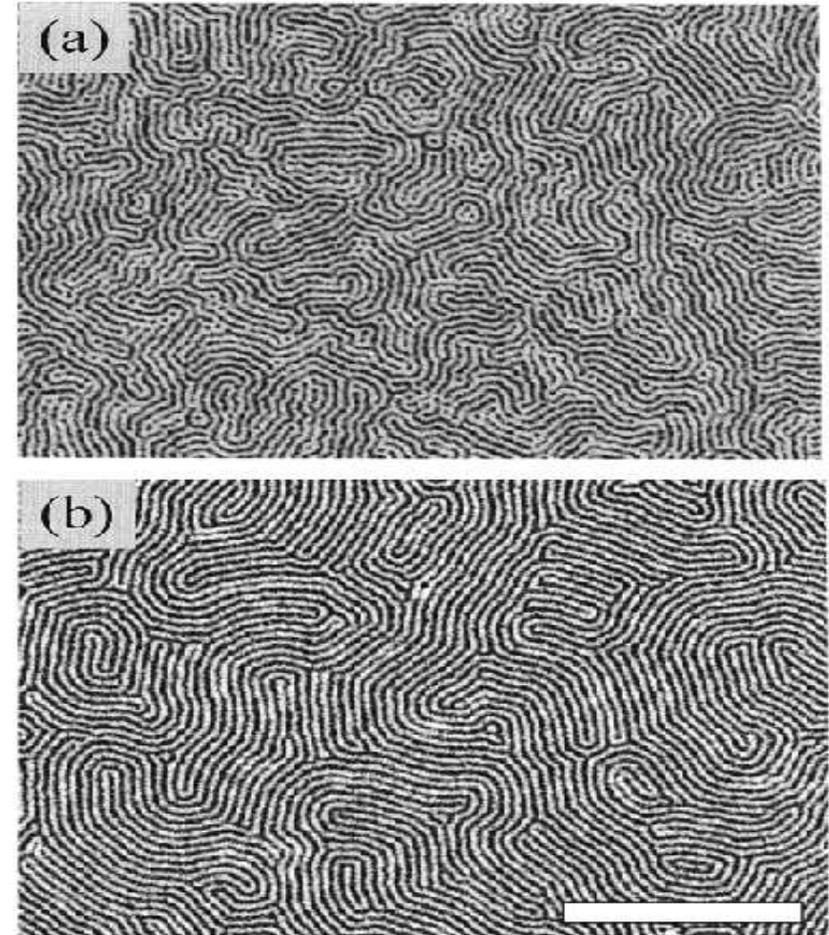
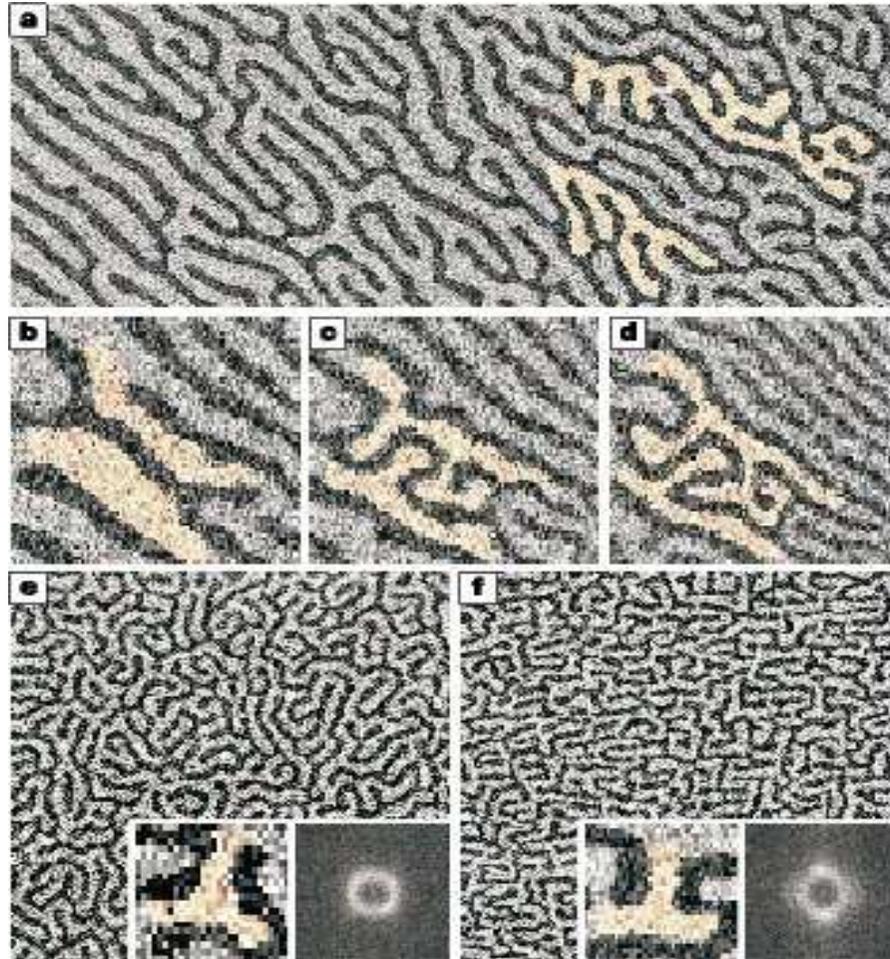
Daniel A. Stariolo

Departamento de Física

Universidade Federal do Rio Grande do Sul



Películas delgadas con formación de patrones



Izquierda: domínios magnéticos en películas ultradelgadas de Fe/Cu(001), O. Portmann *et al.* Nature **422**, 701 (2003).

Derecha: Polímeros de dibloque SBS recocidos sobre diferentes substratos de silicio, C. Harrison *et al.*, Macromolecules **33**, 857 (2000).

Partículas con núcleo duro + escalón repulsivo

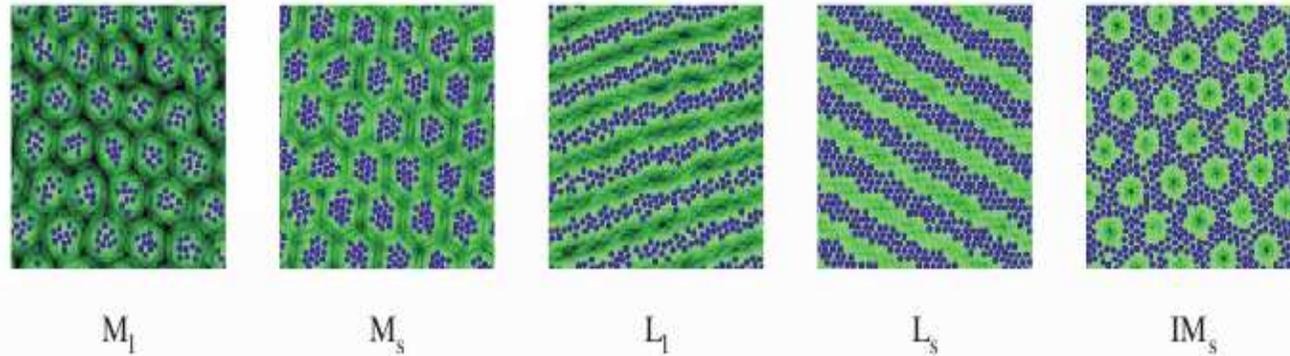


Fig. 1: (Color online) Snapshots from Monte Carlo simulations of the solid and liquid modulated phases of two-dimensional hard-core/soft-shoulder particles with $\sigma_s/\sigma = 5$; shown are the solid (M_s) and liquid (M_1) micelle phases, solid (L_s) and liquid (L_1) lamellar phases, and the solid inverse micelle phase (IM_s). The blue circles are the hard cores of the particles and the overlapping diffuse green circles represent their soft shoulders.

M. A. Glaser et al., *Europhys. Lett.* **78**, 46004 (2007)

Mecanismo de Reacción-Difusión en sistemas biológicos

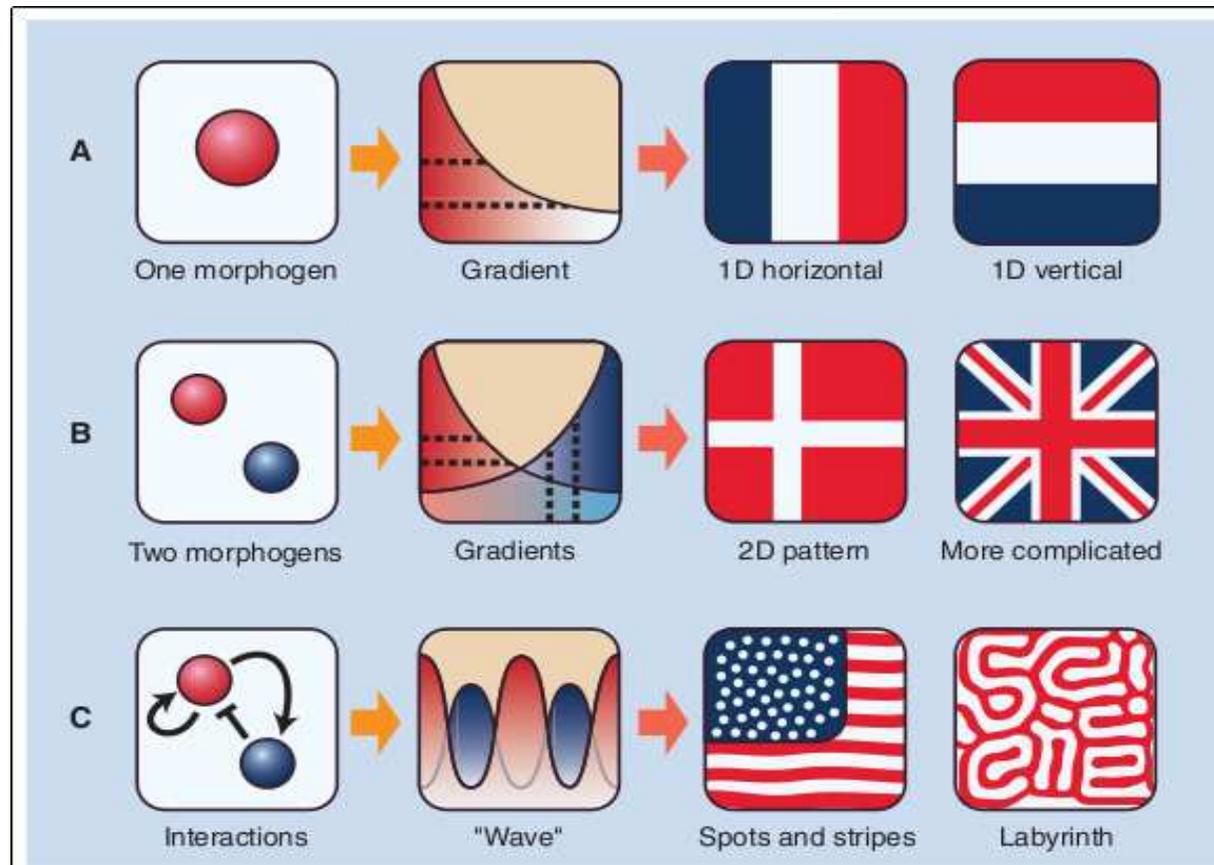
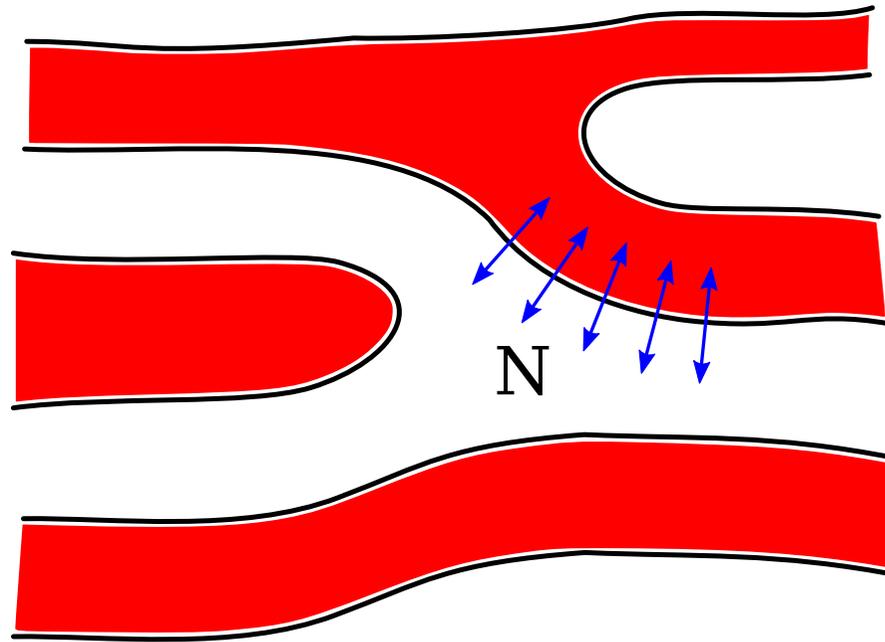


Fig. 1. Schematic drawing showing the difference between the morphogen gradient model and Turing model. **(A)** A morphogen molecule produced at one end of an embryo forms a gradient by diffusion. Cells "know" their position from the concentration of the molecule. The gradient is totally dependent on the prepattern of the morphogen source (boundary condition). **(B)** Adding a second morphogen produces a relatively complex pattern; but with no interactions between the morphogens, the system is not self-regulating. **(C)** With addition of the interactions between the morphogens, the system becomes self-regulating and can form a variety of patterns independent of the prepattern. [Art work by S. Miyazawa]

S. Kondo and T. Miura, *Science* **329**, 1616 (2010).

- Física gobernada por **competición** entre interacciones de **corto alcance** y **largo alcance** .
- La competición en diferentes escalas genera **frustración** en las interacciones, que inhibe la tendencia a formar orden de largo alcance , apareciendo como consecuencia estructuras complejas como **fajas, burbujas, vórtices, laberintos, fases tetragonales, nemáticas, columnares**.
- La competición entre orden **posicional** y **orientacional** da lugar a fases similares a las observadas en **cristales líquidos**.
- Ejemplos entre **sistemas clásicos** como películas magnéticas, polímeros de dibloque, suspensiones coloidales, microemulsiones y **sistemas cuánticos** como líquidos electrónicos, sistemas Hall, superconductores de alta temperatura crítica, aisladores dopados de Mott.
- Mecanismos genéricos comunes con sistemas biológicos formadores de patrones (reacción-difusión).

Orden orientacional de interfaces



Si $\phi(\vec{x})$ representa una densidad, luego $\mathbf{N}(\vec{x}) \equiv \nabla\phi(\vec{x}) = (\partial_x\phi, \partial_y\phi)$ es el *campo director* en dos dimensiones.

Pero el parámetro de orden debe ser simétrico frente a rotaciones en π . Entonces podemos definir un *tensor simétrico de traza nula*:

$$Q_{ij}(\vec{x}) \equiv \phi(\vec{x}) \left(\partial_i\partial_j - \frac{1}{2}\partial^2\delta_{ij} \right) \phi(\vec{x}),$$

donde $i, j = \{x, y\}$.

Interpretación física del parámetro de orden

El parámetro de orden **global médio** es:

$$\begin{aligned}\langle Q_{ij} \rangle &= \langle \int d^2x Q_{ij}(\vec{x}) \rangle = \langle \tilde{Q}_{ij}(\vec{k} = 0) \rangle \\ &= \int d^2k \left(k_i k_j - \frac{1}{2} k^2 \delta_{ij} \right) \langle \tilde{\phi}(\vec{k}) \tilde{\phi}(-\vec{k}) \rangle\end{aligned}$$

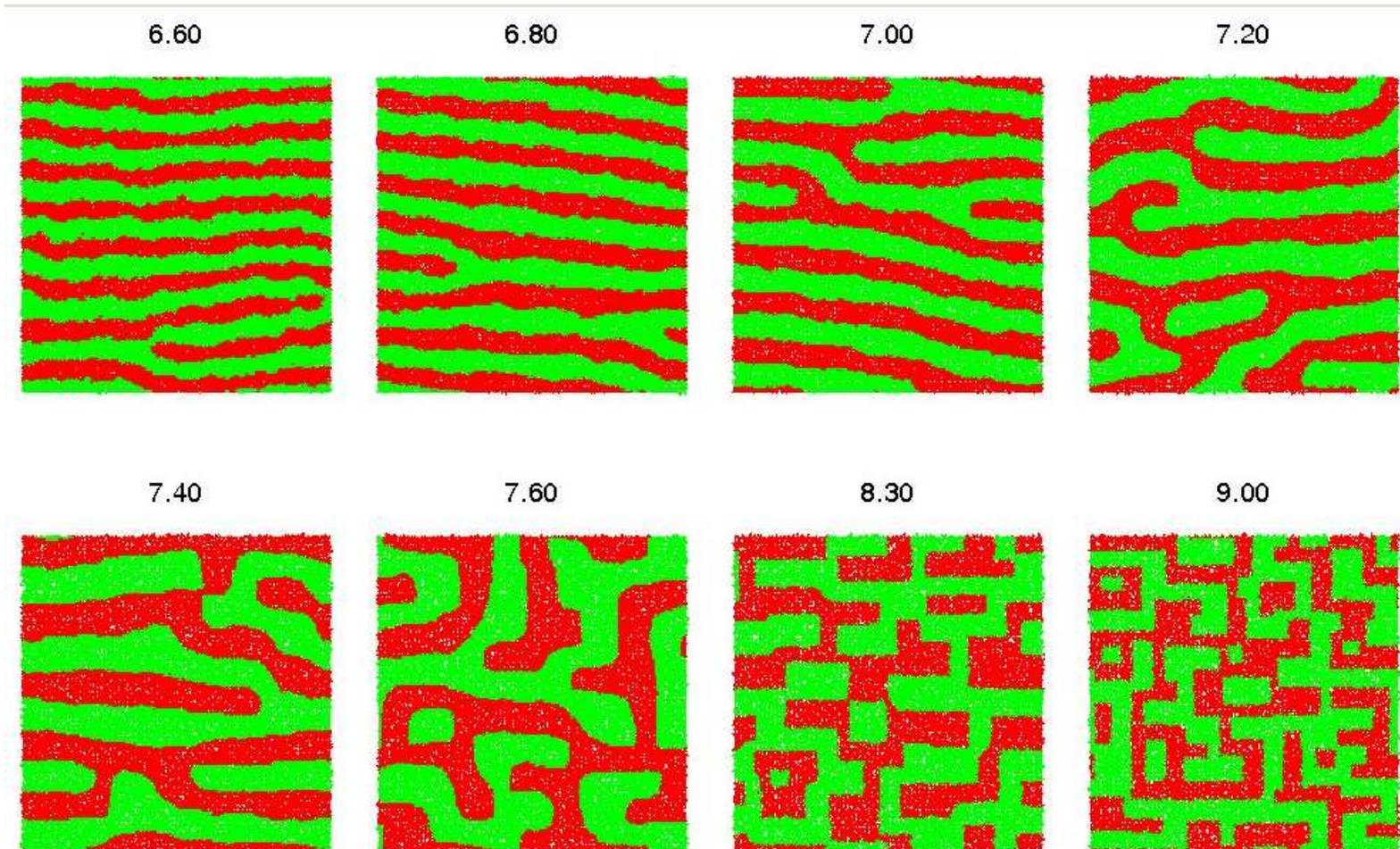
Si elegimos el eje x como eje principal, el tensor tiene un único elemento independiente:

$$\langle Q \rangle \equiv \langle Q_{xx} \rangle = \int d^2k k^2 \cos(2\theta) G(\vec{k})$$

donde $k_x = k \cos \theta$, $k_y = k \sin \theta$ y $G(\vec{k})$ es el factor de estructura.

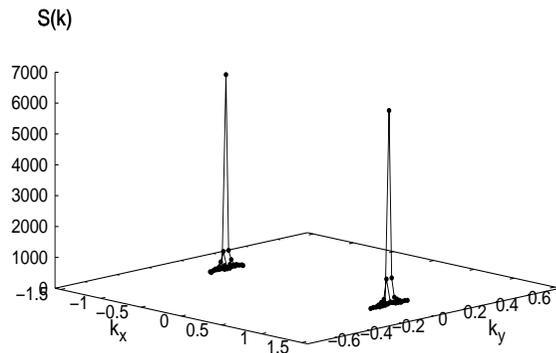
Este parámetro “nemático” cuantifica el grado de anisotropía del patrón de dominios

Evolución de orden orientacional en paredes de dominio

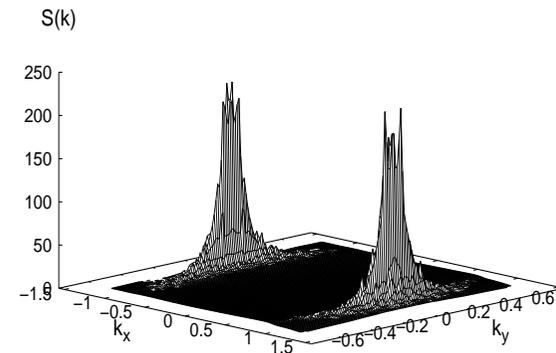


Simulación de Monte Carlo de la evolución de dominios magnéticos con la temperatura en un ferromagneto de Heisenberg con anisotropía perpendicular e interacciones dipolares competitivas.

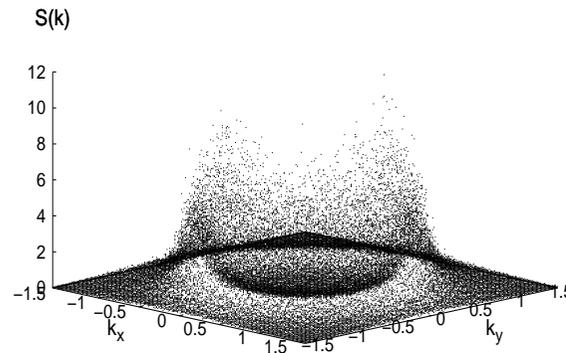
Modelo con interacciones de intercambio y dipolares competitivas



$$\langle Q \rangle \sim 1$$



$$\langle Q \rangle \sim 0.8$$



$$\langle Q \rangle \sim 0.1$$

Factor de estructura de un modelo con competición entre interacciones de intercambio y dipolares en una película bidimensional. Las estructuras son características de las fases de fajas, nemática y (casi)isotrópica. [L. Nicolao and D. A. S., PRB 76 054453 \(2007\)](#)

El modelo de Brazovskii en d=2: soluciones de stripes

$$\mathcal{H}_{Br} = \frac{1}{2} \int d^2 \vec{x} [(\nabla \phi(\vec{x}))^2 + r_0 \phi^2(\vec{x}) + u_0 \phi^4(\vec{x})] + g \int d^2 \vec{x} \int d^2 \vec{x}' \phi(\vec{x}) K(|\vec{x} - \vec{x}'|) \phi(\vec{x}')$$

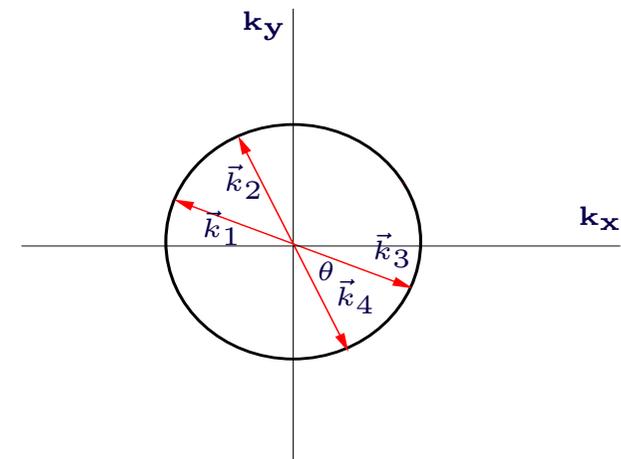
En el espacio recíproco $\mathcal{H}_{Br} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_i$ con:

$$\mathcal{H}_0 = \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \phi(\vec{k}) (r_0 + c(k - k_0)^2 + \dots) \phi(-\vec{k})$$

$$\mathcal{H}_i = u_0 \int \frac{d^2 k_1}{(2\pi)^2} \frac{d^2 k_2}{(2\pi)^2} \frac{d^2 k_3}{(2\pi)^2} \frac{d^2 k_4}{(2\pi)^2} \phi(\vec{k}_1) \phi(\vec{k}_2) \phi(\vec{k}_3) \phi(\vec{k}_4) \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3 + \vec{k}_4)$$

- Transición isotrópica-stripes de primer orden inducida por fluctuaciones
- $\phi(\vec{x}) = A \cos(\vec{k}_0 \cdot \vec{x})$
- Fluctuaciones angulares de \vec{k}_0 no cuestan energía

Brazovskii, JETP 41, 85 (1975)



El modelo extendido: simetría nemática

- La isotropía impone que los vectores de onda estén sobre la circunferencia, entonces $u(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4) = u(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4)$.
- La conservación de la cantidad de movimiento permite eliminar uno de los cuatro k 's.
- Fijando dos de ellos los otros dos quedan fijos automáticamente por la necesidad de estar sobre la circunferencia.
- Por invariancia rotacional la interacción puede depender apenas de la diferencia entre los dos ángulos independientes:

$$u(\theta_1, \theta_2, \theta_1 + \pi, \theta_2 + \pi) = u(\theta_1 - \theta_2) = u(\theta)$$

- Finalmente, invariancia frente a permutaciones de índices en $u(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4)$ implica $u(\theta) = u(\theta + \pi)$, que es la marca de simetría nemática. Luego u puede ser desarrollada en serie de Fourier:

$$u(\theta) = u_0 + u_2 \cos(2\theta) + u_4 \cos(4\theta) + \dots$$

Los dos primeros términos de interacción se pueden escribir como:

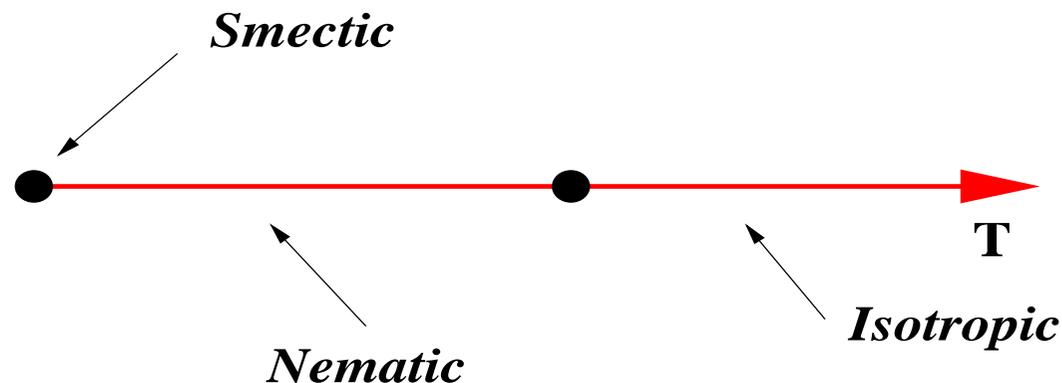
$$\mathcal{H}_i = \int d^2x \{ u_0 \phi^4(\vec{x}) + u_2 \text{Tr} Q^2 \}$$

Resultados del modelo de Brazovskii extendido

Para un sistema con **interacciones competitivas isotrópicas** y espectro de fluctuaciones

$$G^{-1}(\vec{k}) = r_0 + (k - k_0)^2$$

- Orden de stripes de largo alcance inestable en $d=2$.
- Una fase nemática es posible, sin orden posicional pero con orden orientacional de cuasi-largo alcance.
- La teoría de Landau da como resultado una transición isotrópico-nemática de segunda orden a una temperatura finita.
- Fluctuaciones gaussianas sobre la solución de campo medio llevan la transición a la clase de universalidad de Kosterlitz-Thouless.



Hacia un modelo microscópico: el parámetro de orden nemático en la red

$$Q_{ij}^k = \Delta_i S^k \Delta_j S^k - \frac{1}{2} (\Delta S^k)^2 \delta_{ij}$$

donde k es un sitio en la red y $i, j = x, y$. Δ_i son diferencias finitas y S^k son variables de Ising

Introducimos un campo nemático externo conjugado al parámetro de orden:

$$\mathcal{H}_h = h_{ij}^k \left(\Delta_i S^k \Delta_j S^k - \frac{1}{2} (\Delta S^k)^2 \delta_{ij} \right)$$

y elegimos el campo sobre los ejes principales

$$h_{ij}^k = \begin{pmatrix} h_k & 0 \\ 0 & -h_k \end{pmatrix}$$

La interacción se puede escribir en la forma:

$$\mathcal{H}_h = \frac{1}{2} \sum_{ij} h_i S_i T_{ij} S_j \quad T_{ij} = \begin{cases} +1 & \text{if } j = i \pm \hat{x} \\ -1 & \text{if } j = i \pm \hat{y} \end{cases}$$

Prototipo: modelo de Ising con interacciones competitivas

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{NN} (J_{ij} - h_i T_{ij}) S_i S_j + \frac{1}{2} \sum_{NNN} K_{ij} S_i S_j - \sum_i B_i S_i$$

$S_i = \pm 1$: variables Ising

$J_{ij} < 0$: interacción ferromagnética a primeros vecinos (atractiva)

$K_{ij} > 0$: interacción antiferro a segundos vecinos (repulsiva)

El parámetro de orden nemático local es

$$\langle P_i \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial h_i} = \langle S_i S_{i+\hat{x}} - S_i S_{i+\hat{y}} \rangle$$

y el global

$$Q = \sum_i \langle P_i \rangle = \sum_i \langle S_i S_{i+\hat{x}} - S_i S_{i+\hat{y}} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{ij} T_{ij} \langle S_i S_j \rangle$$

Es un promedio anisotrópico de la función de correlación entre vecinos próximos

Conclusiones y perspectivas

- Introducimos un parámetro de orden orientacional, con simetría nemática, adecuado para caracterizar orden orientacional en interfaces en $d=2$.
- La teoría de Landau de este parámetro de orden predice una transición isotrópico-nemática, que es del tipo KT para interacciones isotrópicas en $d=2$.
- Introducimos un formalismo microscópico para un modelo de Ising con interacciones competitivas.
- Físicamente, orden orientacional es dado por un promedio anisotrópico del factor de estructura.
- En principio, el formalismo presentado para detectar fases nemáticas puede ser aplicado a cualquier sistema con interacciones competitivas.
- Inclusión de campos externos es inmediata.
- El formalismo se puede generalizar para tratar otros tipos de orden orientacional, como por ejemplo fases hexáticas o tetragonales.

Gracias a

Daniel G. Barci, **Rio de Janeiro**

Sergio A. Cannas, Pancho Tamarit, Orlando Billoni,
Santiago Pighín, Marianela Carubelli, **Córdoba**

Mateus Michelon, **Campinas-Petrobras**

Lucas Nicolao, **Porto Alegre-Roma La Sapienza**

Roberto Mulet, Rogelio Díaz-Mendez, Alejandro Mendoza-Coto, **La Habana**

Danilo Pescia, Oliver Portmann, Niculin Saratz, Alessandro Vindigni, **ETH - Zurich**

