

TÍTULO

Materiais ferromagnéticos: Da teoria de Weiss às tecnologias do século XXI

ORIENTADOR

Nei Lopes (CBPF/COTEO)

INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA

Em física da matéria condensada, comumente estamos interessados em descrever sistemas contendo um número muito grande de partículas. Estes sistemas de interesse, geralmente, apresentam-se na natureza, quando estão no seu estado de equilíbrio, em diversas fases termodinâmicas. Os exemplos mais familiares são as fases sólida, líquida e gasosa das diversas substâncias. Entretanto, existem outros exemplos de fases da matéria menos familiares no nosso cotidiano. Podemos citar, por exemplo, compostos que podem apresentar várias fases magnéticas, como paramagnetismo (quando os spins do material estão desordenados), ferromagnetismo (em que os spins do material se alinham numa determinada direção dando origem a uma magnetização líquida diferente de zero), antiferromagnetismo (quando os spins do material se alinham de maneira alternada, de modo que não há magnetização líquida), ferrimagnetismo (em que há tanto uma magnetização líquida quanto uma alternada) e vidros de spin (em que os spins se congelam em direções aleatórias).

Podemos citar também algumas outras fases exóticas da matéria que aparecem em sistemas de física da matéria condensada que contém muitas partículas, como metais que apresentam uma fase supercondutora quando submetidos a baixas temperaturas (na fase supercondutora o composto conduz corrente elétrica sem dissipação), fase de ferroeletricidade, em que existe uma polarização elétrica (momentos de dipolo elétrico) permanente, fase de superfluidez a baixas temperaturas, fenômeno análogo à supercondutividade, em que alguns líquidos (geralmente, os isótopos ^3He e ^4He) fluem sem viscosidade por capilares, fases de ondas de densidade de carga (também chamadas de CDWs, do acrônimo em inglês Charge Density Waves), em que a densidade eletrônica adquire um padrão periódico comensurado (ou incomensurado) com a rede cristalina. Por fim, temos também os cristais líquidos, cujas moléculas alongadas se alinham de modo a quebrar a simetria de rotação sem que haja quebra de simetria de translação como num sólido.

Todas essas fases exibem uma fenomenologia bem específica, o que as torna únicas e diferentes uma das outras. As transições entre uma fase ou outra nos sistemas eletrônicos fortemente correlacionados, geralmente, ocorre quando mudamos algum parâmetro externo como temperatura, pressão, volume, campo magnético ou campo elétrico. Além disso, essas transições são classificadas como transições de primeira ou segunda ordem, de acordo com a descontinuidade (primeira ordem) ou continuidade (segunda ordem) das primeiras derivadas da energia livre do sistema. Do ponto de vista termodinâmico, uma transição de fase descontínua é acompanhada de um salto descontínuo da entropia, que é o calor latente, e de uma variação descontínua do volume (como nas transições sólido-líquido ou líquido-gás) ou da magnetização,

no caso de sistemas magnéticos. Dessa forma, podemos concluir que uma transição de fase contínua não apresenta calor latente ou descontinuidades de volume (ou, equivalentemente, densidade) ou na magnetização.

Dentre todas as fases exóticas da matéria supracitadas, podemos destacar, em particular, para este plano de trabalho, inúmeros sistemas que contêm elementos dos metais de transição ou de terras raras que exibem uma magnetização espontânea abaixo de uma determinada temperatura crítica (T_c), também conhecida como temperatura de Curie. Os exemplos mais comuns, dentre estes elementos, são o Fe (Ferro), Co (Cobalto) e Ni (Níquel). Além disso, a magnetização em alguns desses compostos pode ter sua origem no alinhamento dos momentos magnéticos (geralmente de spin) de elétrons que residem em orbitais localizados (magnetismo localizado) ou a magnetização pode ocorrer nos elétrons itinerantes, como é o caso do Fe, Co e Ni.

É bem conhecido na literatura que a descrição microscópica desses compostos pode ser feita através do modelo de Heisenberg. Entretanto, em particular, em alguns compostos como YFeO_3 , CrBr_3 ou LiHoF_4 , é observado experimentalmente que os spins do material só podem apontar em uma determinada direção, no sentido positivo ou negativo. Esses materiais são chamados de ferromagnetos uniaxiais ou de eixo fácil, e neste caso, o modelo de Heisenberg pode ser simplificado, o qual é conhecido na literatura como o modelo de Ising. A partir da resolução do modelo de Ising, podemos discutir inúmeros conceitos associados às transições de fase, como parâmetro de ordem, energia livre do sistema, quebra espontânea de simetria, expoentes críticos do sistema, classes de universalidade, entre outros.

A teoria de Weiss do ferromagnetismo é um modelo teórico que explica o comportamento dos materiais ferromagnéticos. Ela foi proposta por Pierre Weiss em 1907 para descrever o comportamento crítico de ferromagnetos uniaxiais (de eixo fácil), e também é conhecida como a teoria de campo médio de Weiss. Nesta teoria, cada spin da rede interage apenas com seus primeiros vizinhos. Supõe-se que cada spin pode ser escrito como seu valor médio mais flutuações em torno da média. Desprezando os termos de ordem quadráticos na interação e considerando o caso de magnetização uniforme, podemos obter a magnetização por sítio, obtendo uma equação autoconsistente para a magnetização que pode ser resolvida analiticamente ou numericamente. A partir da solução desta equação, podemos descrever a transição paramagnética-ferromagnética que ocorre nos ferromagnetos uniaxiais ou de eixo fácil.

Vale destacar que o formalismo matemático utilizado para a resolução da teoria de Weiss do ferromagnetismo também pode ser aplicado em outros sistemas de matéria condensada, como por exemplo, na teoria BCS da supercondutividade. Portanto, os(as) estudantes podem aprender uma técnica padrão de solução de problemas em sistemas interagentes na área de física da matéria condensada, conhecida como aproximação de campo médio. Além da aplicação dos conceitos básicos de termodinâmica e mecânica estatística para descrever as transições de fase em materiais magnéticos. Portanto, podemos afirmar que os(as) estudantes terão uma visão geral sobre transições de fase em sistemas magnéticos e, conseqüentemente, sobre o aparecimento de fases não convencionais da matéria em sistemas fortemente correlacionados, onde as interações eletrônicas desempenham um papel crucial.

OBJETIVOS

- Entender o que são materiais magnéticos e as suas principais características/aplicações tecnológicas;
- Discutir sobre o conceito de spin e a sua relação com o magnetismo nos materiais;
- Investigar como as transições de fase ocorrem na prática;
- Estudar o formalismo de campo médio;
- Aplicar o formalismo de campo médio para ferromagnetos uniaxiais;
- Obter as propriedades termodinâmicas dos ferromagnetos uniaxiais na teoria de Weiss;
- Resolver analiticamente e numericamente a equação autoconsistente resultante da aproximação de campo médio na teoria de Weiss.

METODOLOGIA

A pesquisa possui um cunho teórico, portanto, a metodologia empregada para o desenvolvimento e acompanhamento das atividades do plano de trabalho será através de reuniões semanais ou quinzenais, de acordo com o avanço do(a) estudante. O avanço do(a) estudante sobre o tema será confirmado via seminários e discussões sobre o material fornecido ao(a) estudante para estudo/pesquisa. O material necessário para o desenvolvimento da pesquisa são materiais básicos como computador, acesso a livros e periódicos de revistas científicas, e materiais de escritório como impressora, papel, caneta, etc. O que garante o desenvolvimento/cumprimento do nosso plano de trabalho para o projeto de pesquisa e, consequentemente, o aprendizado do(a) estudante.

HABILIDADES ADQUIRIDAS

- Conhecimento sobre um dos modelos mais famosos na área de magnetismo.
- Aplicação de conceitos de termodinâmica e mecânica estatística;
- Conhecimento sobre transições de fase de maneira geral e a sua classificação atual;
- Aprendizagem de um formalismo geral para solução de sistemas interagentes (aproximação de campo médio);
- Solução de equação autoconsistentes (analiticamente e numericamente);
- Construção de gráficos de propriedades termodinâmicas e análise dos resultados;
- Conhecimento sobre sistemas magnéticos e as suas aplicações no nosso cotidiano.

CRONOGRAMA DE ATIVIDADES

Atividade/Mês	1º	2º	3º	4º	5º	6º	7º	8º	9º	10º	11º	12º
Atualização bibliográfica	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
Desenvolvimento da pesquisa	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
Participação em congresso/evento										X	X	X
Apresentação de relatório										X	X	X

REFERÊNCIAS

- Silvio R. A. Salinas. Introdução à física estatística. 2a edição. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo. 2018.
- Ivan S. Oliveira e Vitor L. B. de Jesus. Introdução à física do estado sólido. 3a edição. Editora livraria da física (2017);
- Nigel Goldenfeld. Lectures on phase transitions and the renormalization group. Frontiers in physics (1992).
- James F. Annett. Superconductivity, superfluids and condensates. Oxford University Press, (2003);
- Neil W. Ashcroft e N.D. Mermin. Física do estado sólido. São Paulo (2011);
- E. Miranda. Transições de fase e o grupo de renormalização. (2005).