

ARRANJOS GEOMÉTRICOS E MAGNÉTICOS DE ESTRUTURAS SÓLIDAS

CAROLINA GARCIA CARDOSO¹; ARTHUR KRINDGES²,
CARLOS ALBERTO VAZ DE MORAIS JUNIOR³;

¹Universidade Federal de Pelotas - UFPel – carol52200211@gmail.com

²Universidade Federal de Pelotas - UFPel – arthurkrindges@gmail.com

³Universidade Federal de Pelotas - UFPel – carlosavjr@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

A Física possui como princípio o entendimento das leis que regem a natureza e a descrição de seu comportamento, logo, suas áreas de pesquisa também seguem esses objetivos. A física da matéria condensada, em especial, abrange em seu campo de estudo materiais sólidos e líquidos, denominados condensados, tendo como objetivo compreender o comportamento desses, assim como investigar melhorias e aplicações possíveis para os mesmos. Dentro da física da matéria condensada diversas propriedades de um material podem ser estudadas, nosso foco serão as propriedades magnéticas.

Para explicar o comportamento magnético de alguns materiais é necessário conhecer o arranjo entre as partículas que o compõem e descrever seu comportamento microscópico através da Mecânica Estatística e da Termodinâmica. O estado de equilíbrio das propriedades macroscópicas é determinado pelo macroestado de maior probabilidade, no caso do magnetismo temos os comportamentos: diamagnético (DM), paramagnético (PM), ferromagnético (FM), antiferromagnético (AF), ordens provenientes da frustração, entre outros. Portanto, é necessário compreender o mundo microscópico para avaliar as possíveis variâncias macroscópicas e aplicações de um material.

Sabendo da importância do entendimento microscópico, este trabalho tem como foco a discussão inicial de como o arranjo geométrico da rede de materiais sólidos influencia nas propriedades magnéticas do mesmo.

2. METODOLOGIA

Segundo Gupta (1995) os sólidos são divididos pelo tipo de suas redes em: cristalinos, quase cristalinos e não-cristalinos. Sólidos cristalinos possuem ordem de curto alcance e de longo alcance, assim como periodicidade translacional¹. Já os quase cristalinos possuem ordem de longo alcance, mas sem periodicidade translacional². Os não-cristalinos não possuem nenhuma das ordens citadas, mas são divididos entre topologicamente ordenados³ e topologicamente desordenados⁴.

Os sólidos não-cristalinos possuem duas divisões de acordo com o comportamento termodinâmico e as diferenças entre suas fases sólida e líquida. Quando o material apresenta a chamada Transição Vítreia (passagem do líquido

¹ Rede composta de várias cópias iguais de uma estrutura por longas distâncias, sem presença de rotação.

² Rede com cópias estruturais rotacionadas.

³ Rede de estruturas com número definido de átomos que são arranjados de formas distintas.

⁴ Nenhuma ordem na disposição e número de átomos por estrutura.

para o sólido mantendo o mesmo ordenamento de curto alcance) ele é denominado um sólido vítreo. Caso não apresente Transição Vítreo e sua fase sólida possuir ordenamento de curto alcance diferente de sua fase líquida, é chamado de sólido amorfo.

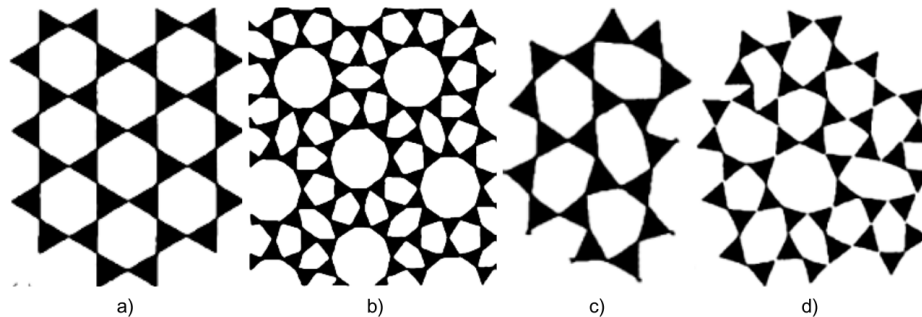


Figura 1. Representação dos diferentes tipos de sólidos. Sendo (a) cristalino, (b) quase-cristalino, (c) não-cristalino topologicamente ordenado e (d) não-cristalino topologicamente desordenado. Adaptado de: GUPTA, 1995.

Para compreender como o arranjo geométrico influencia na magnetização do material precisamos partir das propriedades magnéticas microscópicas dos átomos, denominados *sítios*. Cada sítio possui elétrons que contém um dipolo (menor entidade magnética) relacionados com o momento angular de spin \vec{S} , ou somente spin, uma propriedade intrínseca da matéria com componente quantizada. No modelo de Ising quando o spin está paralelo ao eixo que estamos medindo é denominado “up”, para cima, com valor 1. Se o spin estiver antiparalelo com o eixo é denominado “down”, para baixo, com valor -1. Cada sítio possui apenas um grau de spin de liberdade (GARROD, 1995), isto é, cada átomo possui somente um valor de spin que é determinado pela soma dos spins dos elétrons que o constitui. Caso haja prevalência de elétrons com spin up/down, este será o spin do sítio.

Ao estudarmos uma rede finita levantamos as possíveis configurações para os sítios, assim como a interação entre sítios, que resultam em diferentes respostas magnéticas, podendo ser: PM, DM, FM, AF e ferrimagnético.

Focaremos nos materiais FM, AF e ferrimagnéticos, pois os mesmos possuem forças de acoplamento entre os átomos, fazendo sua magnetização macroscópica surgir não somente das contribuições de spin e do momento angular, mas também de como estão arranjos os átomos da rede (CALLISTER, 1940).

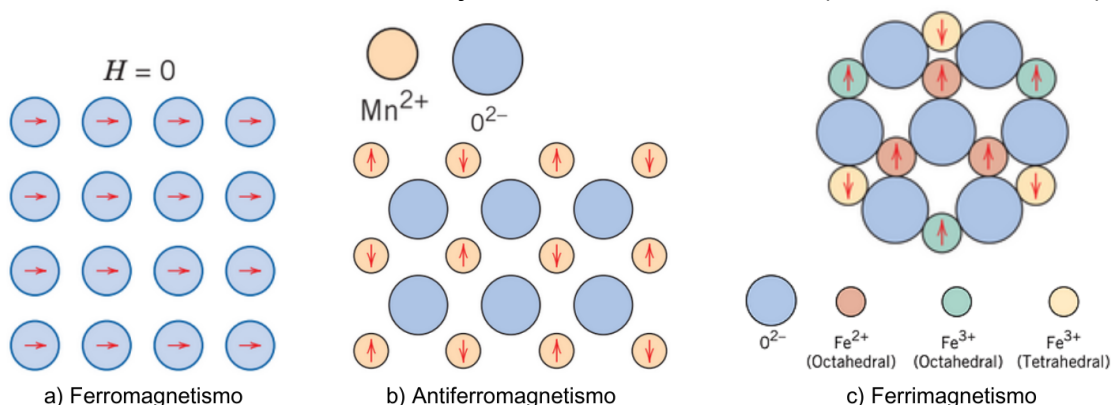


Figura 2. Representação dos diferentes ordenamentos de spin para cada comportamento magnético, onde $H=0$ significa um campo externo nulo. Adaptado de: CALLISTER, 1940.

Materiais FM possuem momento magnético permanente e spins paralelos, a interação de acoplamento reforça a orientação dos sítios vizinhos e a magnetização do material. É o tipo mais forte de magnetismo e fácil de ser observado macroscopicamente, como por exemplo em ímãs naturais. Já AF possuem interação de acoplamento entre sítios que geram spins vizinhos antiparalelos. Esses materiais não exibem magnetização macroscópica porque os momentos magnéticos antiparalelos se cancelam. O Ferrimagnetismo é presente em algumas cerâmicas, suas interações são semelhantes ao AF, mas o formato de sua rede e a configuração de suas ligações não permitem um cancelamento total dos momentos, possuindo magnetização macroscópica (CALLISTER, 1940). Materiais AF contém um caso particular onde a estrutura da rede não permite que todos os sítios sejam desemparelhados com seus primeiros vizinhos, a isso denominamos Frustração Geométrica (FG). Tal efeito ocorre em redes onde o número de sítios é ímpar, sendo necessário que um único sítio tenha dois graus diferentes de liberdade, o que não é possível. Desta forma, a frustração apresenta estados degenerados (MOSSNER, 2006). Aqui surge uma magnetização que não é necessariamente dependente da rede estrutural, mas possui uma estrutura própria de “rede magnética”.

Uma das equações mais importantes para o estudo magnético que demonstram o comportamento das estruturas é o Hamiltoniano do Modelo de Ising (Equação 1). Para um material possuir propriedades magnéticas macroscópicas é preciso ser observado um momento magnético permanente, que é definido na soma das interações dos sítios.

$$H = -h \sum_{i=1}^N S_i - J \sum_{\{i,j\} \in B} S_i S_j, \quad (1)$$

Equação 1. Hamiltoniano, também chamada de função de energia. Relaciona o spin de cada sítio com seus primeiros vizinhos. Fonte: Nishimori, 2001.

O primeiro termo determina a energia de cada sítio onde h é um campo externo aplicado. O segundo termo determina a energia de interação entre primeiros vizinhos, se dois sítios vizinhos possuem interação ferromagnética $\{S_i = S_j\}$ temos $J < 0$ com um comportamento macroscopicamente FM, se $\{S_i \neq S_j\}$ os sítios interagem de forma antiferromagnética, com $J > 0$, sendo macroscopicamente AF (NISHIMORI, 2001).

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Utilizando uma rede finita com 6 sítios, nomeada colméia, analisaremos a interação dos primeiros vizinhos e depois a mudança de comportamento magnético ao considerarmos interação de segundos vizinhos.

Se a interação entre primeiros vizinhos for ferromagnética ($J_1 > 0$), temos uma fase Ferromagnética (FM), caso ($J_1 < 0$) caracteriza-se uma fase Antiferromagnética (AF) (Figura 3).

Considerando segundos vizinhos vamos analisar 2 configurações: com $J_1 < 0$ e $J_2 > 0$ ou o contrário. Dado este grupo de interações (J_1 ou J_2), caso a intensidade das interações forem próximas, haverá competição pela qual será priorizada, gerando uma Frustração Geométrica (FG). Possuindo intensidades suficientemente diferentes, podem surgir fases magnéticas distintas dependendo qual grupo de interações será priorizado. Na rede colméia, quando $J_2 < 0$ há o

surgimento de FG. Considerando somente J_1 a FG não é possível pois temos um número par de sítios, adicionando J_2 surge uma geometria triangular com número ímpar de sítios dentro da colméia, o que possibilita a FG.

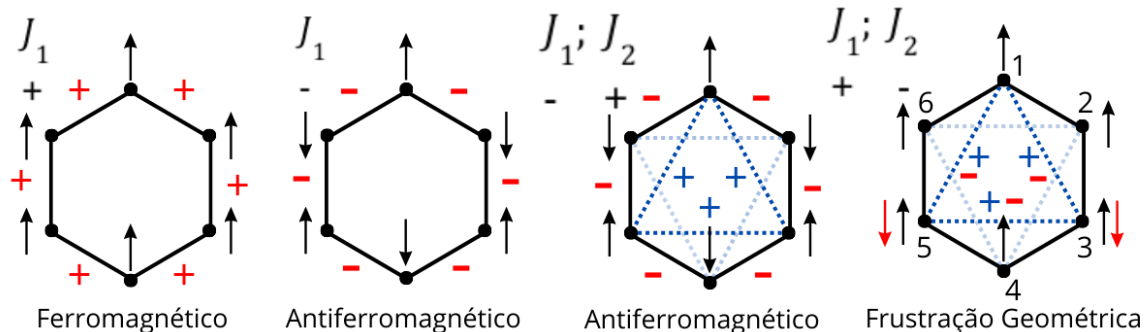


Figura 3. Interações de primeiros e segundos vizinhos de uma rede colméia.
Fonte: O autor.

4. CONCLUSÕES

Conforme discutido na seção de resultados, ao adicionarmos interações J_2 temos o surgimento de frustração geométrica. Portanto, ao adicionarmos mais interações, a energia total será alterada, o que pode conduzir a alterações no comportamento magnético do material. No caso da rede colméia finita abordada, podemos ter interações de até terceiros vizinhos. Em redes com maior número de sítios haverá interações entre mais vizinhos, podendo tornar o comportamento magnético desse material mais complexo de ser estudado.

Foi evidenciado que mudanças estruturais promovem efeitos diversos nas propriedades magnéticas dos materiais. Para possibilidade de trabalho futuro, a técnica de campo médio em cluster pode ser empregada para o cálculo da magnetização do sistema. Nesse cenário, o efeito da competição de interações (frustração) sobre a magnetização pode ser detalhado.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CALLISTER, W.D. **Materials Science and Engineering: An Introduction**. Nova Jersey: John Wiley & Sons, Inc., 1940. 7e.

GARROD, Claude. **Statistical Mechanics and Thermodynamics**. New York: Oxford University Press, 1995.

GUPTA, P. K. **Non-crystalline solids: glasses and amorphous solids**. Journal of Non-Crystalline Solids, v. 195, p. 158-164, July 1995.

MOESSENER, Roderich. RAMIREZ, Arthur P. **Geometrical Frustration**. Physics Today, v. 59, p. 24-29, February 2006.

NISHIMORI, Hidetoshi. **Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing - An Introduction**. Tokyo: Clarendon Press, 2001.