

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DE GOIÁS  
ESCALA DE CIÊNCIAS EXATAS E DA COMPUTAÇÃO  
GRADUAÇÃO EM LICENCIATURA PLENA EM FÍSICA



A TERMODINÂMICA DE MATERIAIS FERROMAGNÉTICOS

JOSIEL DO AMPARO SOUSA

GOIÂNIA

2021

JOSIEL DO AMPARO SOUSA

**A TERMODINÂMICA DE MATERIAIS FERROMAGNÉTICOS**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Escola de Ciências Exatas e da Computação, da Pontifícia Universidade Católica de Goiás, como parte dos requisitos para obtenção do curso de Licenciatura Plena em Física.

Orientador: Dr. André Luiz Cardoso da Silva.

Banca Examinadora:

Dr. Clóves Gonçalves Rodrigues.

Dr. Anderson Costa da Silva.

GOIÂNIA

2021

JOSIEL DO AMPARO SOUSA

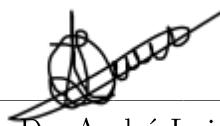
## A TERMODINÂMICA DE MATERIAIS FERROMAGNÉTICOS

Este Trabalho de Conclusão de Curso julgado adequado para obtenção do título de Licenciatura em Física, e aprovado em sua forma final pela Escola de Ciência Exatas e da Computação, da Pontifícia Universidade Católica de Goiás, em **08/06/2021**.

Banca examinadora:

---

Prof. Ms. Ludimilla Reis Pinheiro dos Santos.  
Coordenadora de Trabalho de Conclusão de Curso.



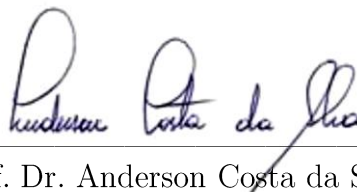
---

Orientador: Dr. André Luiz Cardoso da Silva



---

Prof. Dr. Clóves Gonçalves Rodrigues.



---

Prof. Dr. Anderson Costa da Silva.

GOIÂNIA

2021

*“Dedico a todos os meus familiares e amigos, em especial a minha vó Maria Camila da Silva Sousa as minhas irmãs Josilene do Amparo Sousa e Josielen Amparo de Sousa ao meu irmão Dione do Campos e a minha amada e querida esposa Dinã dos Santos pinheiro.”*

## AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus por sempre me abençoar e iluminar minha caminhada até aqui.

Agradeço a minha família por todo o suporte e apoio e por compreender os momentos que não foram poucos em que fiquei trancado no quarto querendo ficar sozinho para me concentrar nos estudos.

Aos amigos que sempre estiveram presentes direta ou indiretamente em todos os momentos de minha formação, e por sempre me derem forças para continuar na caminhada. A todos os meus professores da graduação, que foram de fundamental importância na construção da minha vida Acadêmica e profissional.

Em especial, gostaria de agradecer ao meu orientador, Dr. André Luiz Cardoso da Silva, pela sua paciência, conselhos e ensinamentos e por ter me orientado durante o meu Trabalho Final de Curso (TCC) e ao Coordenador do curso Dr. Anderson Silva pela organização do curso de Física.

Agradeço à OVG pelo apoio financeiro durante meu curso de graduação, agradeço a PUC GO por proporcionar cursos de qualidade e dos programas na inclusão de alunos ao ensino superior, como suas bolsas de estudos, pois me possibilitou na realização de um sonho, obrigado.

*“a natureza é um enorme jogo de xadrez disputado por deuses, e que temos o privilégio de observar. As regras do jogo são o que chamamos de física fundamental, e compreender essas regras é a nossa meta”.*

Richard Philips Feynman (1918–1988).

## RESUMO

Na teoria microscópica do eletromagnetismo cada elétron possui um momento magnético orbital e de spin que combinam vetorialmente. A resultante dessas duas grandezas vetoriais se combinam vetorialmente com a resultante dos outros elétrons do átomo e a resultante de cada átomo se combina vetorialmente com a resultante dos outros átomos em uma amostra de um material. As propriedades magnéticas dos materiais são resultados da combinação de todos esses momentos dipolares. Essas propriedades podem ser classificadas em três tipos básicos: diamagnetismo, paramagnetismo e ferromagnetismo. Neste TCC propomos estudar a termodinâmica dos materiais ferromagnéticos do ponto de vista didático-pedagógico. Falaremos um pouco da história da sua origem, suas aplicações atuais e sua transição de fase. No final, concluímos com uma implementação simples de programa em MATLAB usando o algoritmo de metropolis em Monte Carlo (MC) para uma rede quadrada de Ising. A partir do programa extraímos algumas propriedades termodinâmicas desse material em temperaturas finitas.

**Palavras chave:** Termodinâmica de Materiais Ferromagnéticos, Monte Carlo Metropolis, Ensino didático-pedagógico. Magnetismo.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1:	Exemplo de agulha magnética. . . . .	3
Figura 2:	Bússola Magnética. . . . .	4
Figura 3:	Susceptibilidade diamagnética e paramagnética. . . . .	9
Figura 4:	Material ferromagnético na presença de um campo externo. . . . .	11
Figura 5:	Saturação do campo magnético. . . . .	12
Figura 6:	Imantação. . . . .	13
Figura 7:	Ordenamento Antiferromagnético. . . . .	14
Figura 8:	Ordenamento Ferromagnético. . . . .	15
Figura 9:	Ferrite . . . . .	15
Figura 10:	Ernesto Ising (1900–1998). . . . .	21
Figura 11:	Rudolf Ernest Peierls (1907-1995). . . . .	22
Figura 12:	Cadeia linear de Spin. . . . .	23
Figura 13:	Monte Carlo implementado no Algoritmo de Metropolis . . . . .	24
Figura 14:	Simulação de MC ( $H=0$ , $J=0.6$ ) . . . . .	34
Figura 15:	Simulação de MC ( $H=0$ , $J=0.8$ ) . . . . .	35
Figura 16:	Simulação de MC ( $H=0.6$ , $J=0.6$ ) . . . . .	36
Figura 17:	Simulação de MC ( $H=0.6$ , $J=0.8$ ) . . . . .	37



**LISTA DE TABELAS**

Tabela 1:	Materiais e Temperatura de Curie. . . . .	9
Tabela 2:	Materiais que possuem $\mu_r$ bem elevado. . . . .	11
Tabela 2:	Materiais antiferromagnéticos. . . . .	14
Tabela 3:	Estados de Spin da Rede quadrada . . . . .	32

## LISTA DE ABREVIATURAS

MC	Monte Carlo
DM	Dinâmica Molecular
CPU	Central de Processamento de Dados
MATLAB	Abreviatura de MATrix LABoratory – Laboratório de Matrizes.

## SUMÁRIO

<b>1.</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> . . . . .	<b>1</b>
<b>2.</b>	<b>O MAGNETISMO.</b> . . . . .	<b>3</b>
2.1	Um breve Histórico do Magnetismo . . . . .	3
2.2	Propriedades Magnéticas da Matéria. . . . .	6
2.2.1	O Diamagnetismo . . . . .	7
2.1.2	O Paramagnetismo. . . . .	9
2.2.3	O Ferromagnetismo . . . . .	10
2.2.4	O Antiferromagnetismo e Ferrimagnetismo. . . . .	13
<b>3.</b>	<b>TERMODINÂMICA DO MAGNETISMO.</b> . . . . .	<b>16</b>
3.1	A Termodinâmica como uma Ciência . . . . .	16
3.2	A Termodinâmica de Materiais Magnéticos. . . . .	17
3.3	O Modelo de Ising. . . . .	20
3.3.1	Ernst Ising . . . . .	20
2.4.2	O Modelo de Ising: Caso Unidimensional. . . . .	26
<b>4.</b>	<b>SIMULAÇÃO DE UM MATERIAL FERROMAGNÉTICO.</b> . . . .	<b>26</b>
4.1	Objetivos da Simulação Computacional. . . . .	26
4.1.1	O Monte Carlo. . . . .	27
4.1.2	O Software MatLab . . . . .	28
4.1.3	O Algoritmo de Metropolis. . . . .	29
4.1.4	Números Pseudo-Aleatórios. . . . .	30
4.4.5	Média de Propriedades Termodinâmicas. . . . .	31
4.2	O Modelo de Material Ferromagnético: Rede Quadrada. . . . .	32
4.2.1	Resultados e Discussões. . . . .	33
<b>5.</b>	<b>CONCLUSÕES FINAIS.</b> . . . . .	<b>38</b>

<b>REFERÊNCIAS</b> .....	<b>40</b>
<b>APÊNDICE A – Termo de Autorização de Publicação de</b> <b>Produção Acadêmica</b> .....	<b>43</b>

## 1. INTRODUÇÃO

Desde a descoberta das propriedades da Magnetita ( $\text{Fe}_2\text{O}_4$ ) pelos gregos, os materiais magnéticos têm recebido uma crescente atenção por parte da comunidade científica. Este interesse se justifica devido à riqueza de novos fenômenos apresentados por estes sistemas e o grande potencial para aplicações nas mais diversas áreas de micro e nanotecnologia. Os materiais magnéticos são largamente utilizados no desenvolvimento de novas tecnologias, desde sistemas de geração e distribuição de energia (hidrelétricas), a sistemas de conversão eletromecânica (eletrodomésticos, automóveis), eletrônicos e de telecomunicações, transdutores, automação industrial até a medicina e a engenharia biomédica (veja, as Revistas de Ensino de Física, RBEF<sup>2</sup>). Isso só foi possível com o entendimento dos fenômenos magnéticos, e com a descoberta de novos materiais magnéticos. Fenômenos estes que são rigorosamente descritos por mecânica quântica e pela mecânica estatística, mas podem ser compreendidos em uma primeira análise utilizando-se uma abordagem macroscópica, possibilitando assim a aplicação de conceitos de física clássica (RIBEIRO, 2000).

Embora o magnetismo não receba a ênfase necessária no ensino médio, está muito presente na vida diária. Pois desde o ímã que é colocado na porta de uma geladeira até a memória (HD – *hard disk*) do computador (ASKELAND, *et al.*, 2008). A propriedades desses materiais magnéticos estão relacionadas com os momentos dipolares e são classificadas em três grupos básicos: diamagnetismo, paramagnetismo, ferromagnetismo e o antiferromagnetismo. A propriedades diamagnéticas existem em todos os materiais, mas é tão fraco que, em geral, não pode ser observada se o material possuir uma das duas propriedades. No diamagnetismo, os momentos dipolares são produzidos por átomos do material apenas quando estes é submetido a um campo magnético externo gerando uma resposta através de um campo magnético de baixa intensidade que desaparece na sua ausência do campo externo (CALLISTER, 2008).

O paramagnetismo é observado em materiais magnéticos que contêm elementos da família dos metais de transição, da família das terras raras ou família dos actinídeos. Os átomos desses materiais possuem momentos dipolares totais diferentes de zero distribuídos de forma aleatória, gerando um campo magnético nulo. Na aplicação de um campo magnético externo os momentos dipolares alinham na direção do campo externo e desaparece em sua ausência. Já o ferro magnetismo é observado apenas no ferro, níquel, cobalto, gadolínio e disprósio (e em compostos e liga desses elementos). Nesses materiais, os momentos dipolares magnéticos de átomos vizinhos se alinham, produzindo regiões com intensos momentos magnéticos. Um campo externo pode alinhar os momentos dipolares das regiões, fazendo com que a amostra do material produza um forte campo magnético no mesmo sentido do campo externo, que permanece quando ele é removido (CALLISTER, 2008).

Os materiais antiferrimagnéticos, como os ferromagnéticos, são originados pela interação entre dipolos magnéticos, mas existe uma tendência de alinhamento magnético em direções opostas, e alinha momentos magnéticos em direções opostas, assim os momentos vizinhos se cancelam mutuamente. O comportamento da magnetização é semelhante aos materiais paramagnéticos, mas as origens deste comportamento para uns antiferromagnéticos são totalmente diferentes, pois este é um estado ordenado de longo alcance, enquanto o paramagnético é um estado desordenado (CALLISTER, 2008).

Quando se estuda materiais ferromagnéticos observa-se a transição de fases e alguns fenômenos críticos, observados numa variedade muito grande de sistemas físicos como os fluidos simples, mistura de fluidos, materiais magnéticos, ligas magnéticas, superfluidos, supercondutores e cristais líquidos, entre outros. A transição para o ferromagnetismo também tem sido bastante estudada, desde o início da década de 60 por uma teoria fenomenológica proposta por Pierre Curie, e desenvolvida por Pierre Weiss, que apresenta muitos pontos em comum com a teoria de van der Waals apresentada em sua tese de doutorado em 1873. Teorias dessa natureza, conhecidas como teorias clássicas das transições de fase, têm sido utilizadas para descrever os aspectos qualitativos de vários tipos de transição de fases (STANLEY, 1971). Neste sentido, escolhemos esse tema para abordar nesse TCC devido a sua interdisciplinaridade e importância na ciência atual.

No capítulo 2, falaremos um pouco sobre alguns elementos básicos do magnetismo, na tentativa de entender as origens do magnetismo desde o início dos seus estudos na idade antiga até as épocas recentes, discutindo algumas fases magnéticas como o diamagnetismo, o paramagnetismo, o ferrimagnetismo e o antiferromagnetismo. Dando assim uma visão geral e introdutório ao tema magnetismo que hoje é tão abrangente e está tão presente em nossas vidas. No capítulo 3, abordaremos os conceitos sobre o ferromagnetismo e suas aplicações, a termodinâmica, as transições de fase e o modelo desenvolvido por Enert Ising em 1967.

No Capítulo 4, apresentaremos uma solução alternativa para estudar as propriedades termodinâmicas de materiais ferromagnéticos usando uma simulação computacional. O método de Monte Carlo (MC) em algoritmo de Metropolis é implementado em MATLAB (ou OCTAVE) para a solução do modelo de Ising para uma rede quadrada com interação entre primeiros vizinhos. A solução permitiu obter propriedades termodinâmicas na presença e ausência de campos magnéticos externos.

No Capítulo 5, faremos as conclusões finais.

## 2. O MAGNETISMO

### 2.1 Um Breve Introdução sobre o Magnetismo

O magnetismo é a denominação dada aos estudos dos fenômenos referentes às propriedades de materiais que tem a propriedade de atrair ou repelir outros materiais. Os primeiros fenômenos magnéticos foram vistos na Grécia antiga, em uma cidade conhecida como magnésia. O nome magnético provém do grego, a sua origem é dada devido ao Magnes, um pastor grego que teria descoberto acidentalmente as propriedades magnéticas (POMALIS, 2017).

Antes de iniciar o contexto histórico sobre o magnetismo, é pertinente citar alguns exemplos de materiais magnéticos:

- Navegação por bússola;
- Atração de pequenos pedaços de metais por ímãs;
- Atração e repulsão entre ímãs;
- Campo magnético terrestre

De acordo com Tonidandel et al., (2018) registros apontam que em 2634 a.C. as tropas do imperador chinês Huang-ti construíram uma carruagem sobre a qual girava uma figura feminina de braços abertos, indicando para o sul. A explicação que se tem é que seria uma agulha magnética, esses registros e outros provavelmente seriam os primeiros relatos sobre o magnetismo. Como apresentado na Figura 2.1.

Figura 1: Exemplo de agulha magnética.



Fonte: Navioseportos, 2021.

Existem um contexto referente ao conhecimento do magnetismo desde o século VII a.C. por meio de textos gregos que fazem referências às observações de propriedades magnéticas em certos corpos constituídos de um mineral proveniente da região da Magnésia, assim que surgiu o nome magnetismo. Após esses textos tem relatos somente no século VII d.C. com os chineses, relatando a utilização da bússola para caminhos marítimos (BRASIL MAGNETS, 2021).

O primeiro registro não chinês de fenômenos elétricos ou magnéticos ocorreu na Grécia, no século VI a.C. Dentre eles, tem-se a descoberta de fenômenos elétricos associados ao âmbar e fenômenos magnéticos relacionados a magnetita, uma pedra encontrada na região de Magnésia e que teria propriedades magnéticas, seriam atribuídas ao pensador Tales de Mileto (TONIDANDEL et al., 2018, p.158).

Portanto, segundo Tonidandel et al., (2018) tem relatos que Lucretius, poeta filósofo romano que viveu nos anos de 99 a 55 a.C., teria determinado o fenômeno da atração e repulsão magnética com o auxílio de experimentos rudimentares e desenvolvido um modelo não matemático para a ação das forças magnéticas.

A bússola, é outro artefato histórico de suma importância para a história do magnetismo, sendo usada pela primeira vez no mar por volta do ano de 850, Tem-se que as bússolas foram feitas pelos chineses e introduzidas no Ocidente por meio das navegações (TONIDANDEL et al., 2018). Exemplo na figura 2.

Figura 2: Bússola magnética



Fonte: Pomalis, 2007.

De acordo Arndt (2018) a ciência do magnetismo avança consideravelmente na segunda metade do século XIII, nesse período, o francês Petrus Peregrinus disserta sobre o que ele chama de pedra-ímã e traz indicações práticas de como estabelecer qual é o polo norte e qual o sul de um ímã. Também são atribuídos a esse cientista a descoberta de como os polos iguais de uma pedra-ímã se repelem e polos opostos se atraem. Na Figura 3 tem-se a explicação referente a pedra-ímã onde fica fácil compreender.



Entende-se que em uma pedra sempre haverá norte e sul, mesmo ela sendo partida. As linhas de força do campo magnético saem do polo norte para o polo sul, independente do seu formato. Portanto, faz-se necessário compreender como surgiu o magnetismo.

Os estudos experimentais na área foram feitos pelos europeus. Pierre Pelerin de Maricourt, em 1269, descreveu uma grande quantidade de experimentos sobre magnetismo. Devem-se a ele as denominações polo norte e polo sul às extremidades do imã, bem como a descoberta de que a agulha da bússola apontava exatamente para o norte geográfico da Terra (TEIXEIRA, 2019, p.15).

Segundo Teixeira (2019) em relação aos estudos sobre magnetismo apenas ganharam forças a partir do século XIII, quando alguns trabalhos e observações foram feitos referentes a eletricidade e o magnetismo, que ainda eram considerados fenômenos completamente diferentes. Essa teoria foi aceita até o século XIX.

O grande avanço nos estudos sobre magnetismo foi realizado por Oesterd, no ano de 1820. Ele quem descobriu fenômenos elétricos e magnéticos estão inter-relacionados. Sendo essa teoria, denominada eletromagnetismo, cargas elétricas em movimento gera corrente elétrica. Esses estudos foram finalizados por Maxwell que determinou bases teóricas sólidas referente a relação entre o campo elétrico e o magnético (TEIXEIRA, 2019).

Foi por meio de desses fatores históricos que se tornaram possíveis a invenção e o aperfeiçoamento de inúmeros instrumentos que estão presentes nos dias de hoje, como o motor elétrico, a produção de energia nas usinas hidrelétricas, ondas de rádio e televisão, aparelho de telecomunicação etc.

Após textualizar sobre a história do magnetismo faz-se importante trazer seu estudo nos dias de hoje. No ensino da Física, assim como das demais Ciências, é de suma importância que se avalie não apenas “o que aprender física”, mas o “para que ensinar física” (BRASIL, 2006). Devido sua importância e presença recorrente no dia a dia, é importante saber desenvolver práticas pedagógicas que mobilizem uma compreensão razoável da física hoje em dia.

A compreensão do mundo eletromagnético que permeia nosso cotidiano é indispensável para possibilitar o uso adequado, eficiente e seguro de aparelhos e equipamentos, além de fornecer condições para analisar, fazer escolhas e otimizar essa utilização. (BRASIL, 2006, p. 76).

Pode-se dizer que o magnetismo se legitima pela sua importância e presença no dia a dia, mas também essa percepção deve ir além, explorando a possibilidade de levá-los a compreender as múltiplas aplicações desse conhecimento. Assim, pode-se citar algumas aplicações do magnetismo atualmente:

- Microfones;
- Cartões magnéticos;
- Alto-falantes;
- Ressonância-magnética;
- Eletroímãs;
- Discos rígidos.

Portanto, o magnetismo é uma força invisível e isso faz com que ele esteja presente em diversas situações do cotidiano, mesmo que os indivíduos não percebam. Podendo ser apresentado na natureza, ou ainda ser oriundo de fontes artificiais, produzidas pelo homem. Por isso, engana-se quem pensa que o magnetismo é visto apenas nos ímãs.

Inúmeros aparelhos e equipamentos que fazem parte do dia a dia precisam de energia elétrica para funcionar e, além disso, a transmissão de informações ocorre por meio de ondas eletromagnéticas, portanto, poucos indivíduos conseguem atribuir a devida associação nessa área da física.

Estamos cercados de aparelhos cujo funcionamento depende da física do eletromagnetismo, que é uma combinação de fenômenos elétricos e magnéticos. Essa física está presente em computadores, receptores de televisão, aparelhos de rádio, lâmpadas e até mesmo na aderência de um filme plástico a um recipiente de vidro. Essa física também explica muitos fenômenos naturais; não só mantém coesos todos os átomos e moléculas do mundo, mas também produz o relâmpago, a aurora e o arco-íris (HALLIDAY, et al., 2006, p.1).

Entende-se que os conteúdos e elementos referentes ao magnetismo encontram distintos sentidos, mantidos ou aperfeiçoados, segundo as necessidades das práticas históricas, sociais e culturais. Hoje em dia tudo passou por inovação, como já citado o magnetismo está presente no cotidiano, não sendo diferente na área da saúde e pode-se citar uma inovação como: na medicina com a ressonâncias magnética; na nanomedicina, em armazenamento de dados de HD (Hard Disk), em grandes eletroímãs na indústria. Portanto, após conhecer o contexto histórico do magnetismo e suas aplicações hoje em dia, conclui-se que ele é um conjunto de fenômenos referentes a interação entre campos magnéticos, que são as regiões dos espaços em que se encontram sobre a influência de correntes elétricas ou dos momentos magnéticos de moléculas ou partículas elementares.

## 2.2 Propriedades Magnéticas da Matéria

O magnetismo é uma característica do comportamento dos átomos no interior da matéria. É o resultado da combinação do momento angular orbital e do momento angular de rotação do elétron. Como esses momentos angulares se combinam

determinando como o material se comporta na presença de outro campo magnético. É esse comportamento que define as propriedades magnéticas dos materiais. Eles podem ser divididos em três tipos principais: *diamagnéticos*, *paramagnéticos* e *ferromagnéticos*.

### 2.2.1 Diamagnetismo

O *Diamagnetismo* é resultado do movimento orbital dos elétrons que, circulando ao redor do núcleo, formam um anel eletrônico de corrente e produzem um campo magnético. Não se gera um campo magnético ao material, pois para cada órbita têm-se dois elétrons circulando nas opostas e, assim, nenhum momento magnético é produzido. Neste ponto, como ilustração, pode-se calcular a corrente, em ampères, necessária para produzir um magnéton de Bohr. Para um raio da órbita de  $0,53 \times 10^{-10}m$ , tem-se:

$$i = \frac{\mu_B}{A} = \frac{0,53 \times 10^{-24}}{8,83 \times 10^{-24}} = 1,05 \times 10^{-3} \approx 1,0mA \quad (2-1)$$

e podemos fazer uma estimativa do campo magnético,

$$B = \frac{2Ai}{r^3} \times 10^{-7} = \frac{(2)(8,8 \times 10^{-21})(1,05 \times 10^{-3})(10^{-7})}{(0,53 \times 10^{-10})^3} = 12,5T \quad (2-2)$$

Assim, o emparelhamento orbital de dois elétrons girando em sentidos opostos explica o momento magnético nulo dos átomos na ausência de um campo magnético usado externamente ao material. Na presença de um campo externo o emparelhamento fica desbalanceado e, de acordo com a lei de Lenz, haverá uma alteração na velocidade dos elétrons no sentido de evitar qualquer mudança no campo magnético produzido pelo átomo. Em outras palavras, é como se, nos "anéis eletrônicos" correspondentes à órbita dos elétrons fosse gerada uma corrente em sentido contrário, que criaria um campo magnético oposto ao gerado pelo átomo. Assim, se o campo magnético de um elétron, estiver ou não, na direção do campo aplicado, a elétron opõe-se a este campo, diminuindo ou aumentando sua velocidade, mas agora a soma vetorial dos momentos magnéticos no material não é mais nula. Como o anel eletrônico de corrente, não possui resistência elétrica, este efeito permanente enquanto o átomo estiver sujeito ao campo produzido, ou seja, o momento magnético do átomo é diminuído enquanto este permanecer sob a ação deste campo magnético externo, o resultado coletivo de todos os átomos do material é uma reação contrária ao campo magnético e, portanto, a tendência observada macroscopicamente, deste material se afastar do campo fortificado.

A frequência típica ( $\omega$ ) de movimento do elétron é aproximadamente  $10^5 \text{ s}^{-1}$ . A frequência de Larmor  $\Delta\omega$ , dá uma magnitude da variação do movimento do elétron movendo-se, mais rápido ou, mais devagar, quando na presença de um campo magnético externo. Se o átomo for submetido a um campo magnético ( $\mathbf{B}$ ) de 1,0T, a variação na frequência será de:

$$\Delta\omega = \pm \frac{eB}{2m} = \frac{(1,6 \times 10^{-19})(8,8 \times 10^{-21})(1,0)}{2(9,11 \times 10^{-31})} \approx 9 \times 10^{10} \text{ s} \quad (2-3)$$

Dividindo  $\Delta\omega$  por  $\omega$  verifica-se que a alteração na velocidade é de uma parte em dez mil, ou seja, o efeito diamagnético é de magnitude muito pequena. O diamagnetismo é uma propriedade de todos os materiais, mas como um efeito relativamente fraco, ele só pode ser facilmente observado nos materiais que não sejam também paramagnéticos. Substâncias puramente diamagnéticas podem ser caracterizadas por uma propriedade magnética chamada susceptibilidade. Ela é essencialmente uma função do número de elétrons em cada átomo ( $Z$ ), da massa atômica ( $A$ ), do número de Avogadro ( $N$ ), do número de átomos por unidade de volume ( $10^{28} - 10^{30}$  átomos por  $m^3$ ) e da distância média dos elétrons ao núcleo ( $r$ ), pode ser aproximada por:

$$\chi = \frac{\mu_0 Z e^2 r^2 N_A \rho}{6m A} \quad (2-4)$$

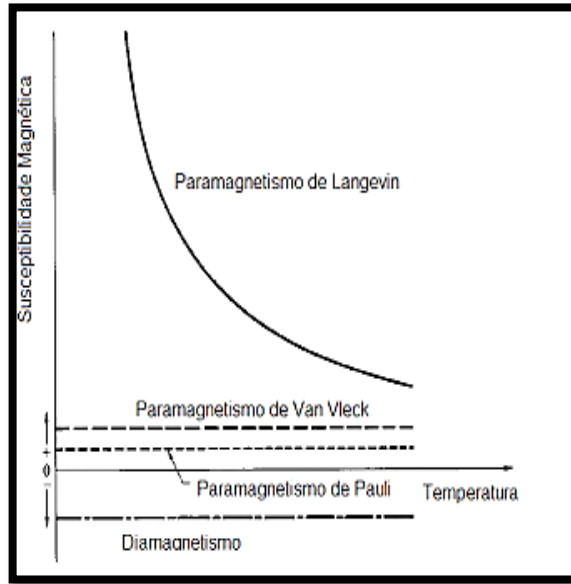
Portanto, a suscetibilidade magnética é negativa e aumenta com o número de elétrons por átomo. A permeabilidade do vácuo  $\mu_0$  é  $4\pi \times 10^{-7}$  Hm e  $N_A$  é o número de Avogadro  $6,02 \times 10^{23}$  mol<sup>-1</sup>. Podemos desse modo, estimar a susceptibilidade magnética do carbono ( $Z=6$  e  $A = 12,0 \times 10^{-3}$ kg) em  $-1,9 \times 10^{-5}$  e a diamante  $-2,2 \times 10^{-5}$ , e do outro  $-3,6 \times 10^{-5}$ . O cobre tem uma susceptibilidade magnética muito próxima de  $-1,0 \times 10^{-5}$ . Observa-se também que esta propriedade é independente da temperatura. Podemos relatar um fenômeno eletrostático bem conhecido correspondente a pedacinhos de papel descarregados ou atraídos por uma barra carregada, ao serem colocados no campo elétrico não-uniforme próximo da extremidade da barra.

As moléculas de papel não têm dipolos elétricos inerentes, e o momento de dipolo induzido no papel pela ação de um campo elétrico externo pode ser usado para explicar essa atração. Geralmente, os materiais diamagnéticos são compostos de átomos encerrados em suas camadas de elétrons, de modo que não geram momentos de dipolo magnético atômico. os materiais diamagnéticos são facilmente repelidos pelo sistema (ímãs, bobinas condutoras de corrente etc.).

### 2.2.2 O Paramagnetismo

O *paramagnetismo* é caracterizado pela sensibilidade positiva e baixa de acordo com sua fonte, possui Forte dependência da temperatura. Caso não seja afetado pela temperatura, podemos ter paramagnetismo descrito por Pauli, frequentemente, aparece em metais (a resposta magnética do gás de elétrons) ou no paramagnetismo de Van Vleck. Devido à mistura do estado fundamental e do campo cristalino do estado excitado próximo à rede, isso ocorre no isolador básico.

Figura 3: Susceptibilidades diamagnética e paramagnéticas e sua dependência com a temperatura.



Fonte: Instituto de física

Na teoria paramagnética de Langevin é considerado que os átomos e moléculas têm momentos magnéticos inerentes e permanentes, e sua distribuição espacial é determinada por estatísticas de Maxwell-Boltzmann. Magnetização  $\mathbf{M}$  e a susceptibilidade são dadas pelas relações,

$$M = N\mu SL(x), \quad (2-5)$$

$$\chi = \frac{N\mu_s H}{3k_B T} N\mu_s L(x), \quad (2-6)$$

onde,

$$L(x) = \cotg(x) - \frac{1}{x} \quad (2-7)$$

onde  $L(x)$  é a função Langevin. No caso de altas temperaturas campos magnéticos de baixa intensidade a uma expansão da função de Langevin mostra que a susceptibilidade e a magnetização ficam proporcional ao campo aplicado. Nos materiais paramagnéticos apenas alguns elétrons nestes materiais podem ser alinhados com o campo elétrico, pois de acordo com a distribuição de Fermi-Dirac, muitos orbitais já são ocupados por spins paralelos. O paramagnetismo de *Van Vleck* é um estudo geral da susceptibilidade magnética das moléculas através da diferença de energia entre o estado fundamental e o estado excitado e o elemento de matriz do operador momento magnético.

### 2.3.3 O Ferromagnetismo

Considerando a capacidade de certos materiais (ferromagnéticos) de responder a campos magnéticos, ferromagnetismo é o nome desse fenômeno. Ele atrai esses materiais por um ímã e continua a magnetizar mesmo quando não há campo magnético, formando assim um ímã permanente. O magnetismo espontâneo de certos materiais é denominado ferromagneto. Embora esse fenômeno tenha sido descoberto há muito tempo, as primeiras teorias para explicá-lo são relativamente novas. (Leeuwen, 1921, p. 361 e Nolting; Ramakanth, 2009)

A seguir, temos uma tabela com alguns materiais ferromagnéticos e suas respectivas temperaturas de Curie.

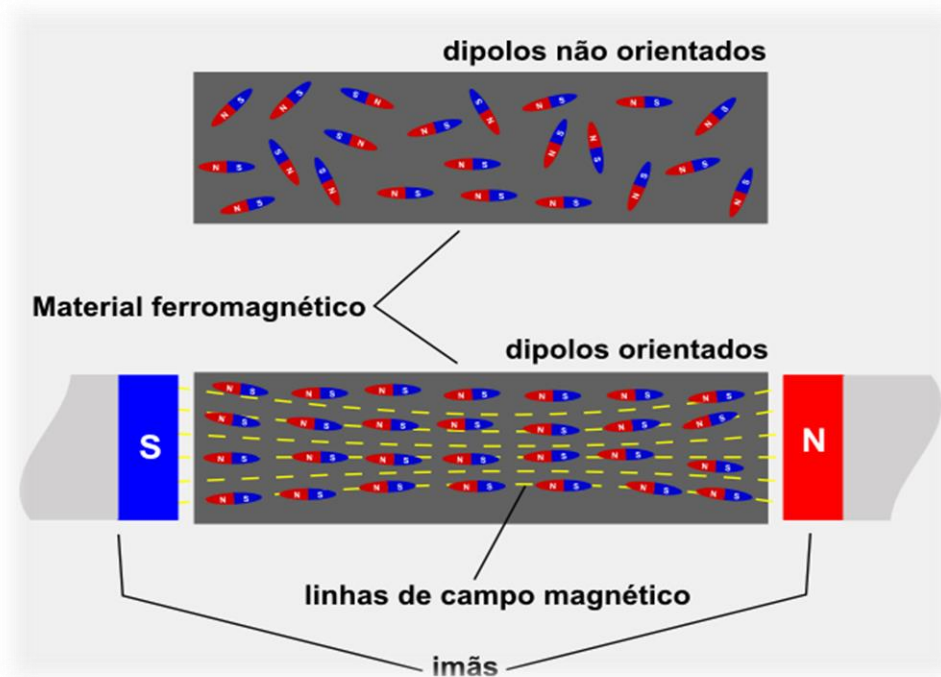
Tabela 1: materiais e temperatura curie

<b>Materiais</b>	<b>Temperatura de Curie (K)</b>
Fe	1 043
Co	1 388
Ni	627
Gd	292
Dy	88
MnAs	318
MnBi	630
MnSb	587
CrO <sub>2</sub>	386
MnOF <sub>e2</sub> O <sub>3</sub>	573
FeOF <sub>e2</sub> O <sub>3</sub>	858
NiOF <sub>e23</sub>	858
CuOF <sub>e2</sub> O <sub>3</sub>	728
MgOF <sub>e23</sub>	713
EuO	69
Y <sub>3</sub> Fe <sub>5</sub> O <sub>12</sub>	560

Fonte: Autor.

Os materiais ferromagnéticos têm em sua estrutura a propriedade de campos magnéticos concentrados passando por eles. Essa característica é muito importante na construção de componentes como indutores e transformadores. As propriedades ferromagnéticas garantem que os domínios magnéticos do material estejam alinhados em uma direção preferencial na presença de um campo magnético externo, que pode ser magnetizado ou atraído pelo ímã. Um exemplo desse material é o ferro. A Figura 4 mostra um material ferromagnético com os dipolos desorientados e depois alinhados com a presença de um campo magnético externo.

Figura 4: Material ferromagnético na presença de um campo magnético externo.



Fonte: JU Lee *et al.* Ising-Type Magnetic Ordering in Atomically Thin FePS<sub>3</sub>. *Nano Letters* 10.1021/acs.nanolett.6b03052 (2016).

A estrutura molecular dos materiais ferromagnéticos se comporta como pequenos dipolos magnéticos. A capacidade dos materiais ferromagnéticos de aumentar o campo magnético é indicada pela permeabilidade,  $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ Hm}$  e a permeabilidade magnética. Temos a Permeabilidade Magnética de um material que é representada pela fórmula a seguir :  $\mu = \mu_r \cdot \mu_0$ . Alguns materiais possuem  $\mu_r$  muito mais elevado conforme a alguns exemplos:

Tabela 2: Materiais que possuem a  $\mu_r$  bem elevado

<b>Materiais</b>	<b><math>\mu_r</math></b>
Ferro	200 a 600
Níquel	100
Permaloy	8000
Mumetal	20000

Fonte: Autor (2000)

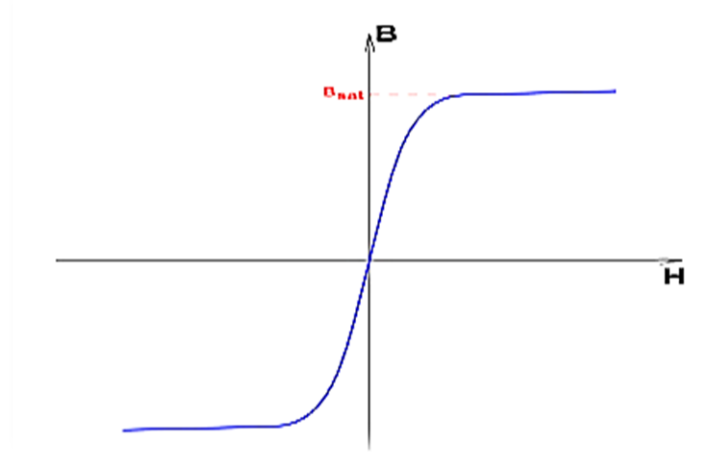
O campo magnético externo é geralmente representado pela letra  $H$ , e o campo magnético induzido no material é representado pela letra  $B$ . Portanto, a relação entre esses dois campos é a seguinte:

$$B = \mu H \quad (2-8)$$

#### *Saturação:*

A saturação ocorre na medida que aumentamos a força do campo elétrico externo, os dipolos do material se alinham mais fortemente com as linhas de força magnética. Às vezes, uma vez que o dipolo atingiu a direção máxima possível, não há necessidade de aumentar o campo magnético externo. No momento em que, a equação (2-8) para o campo  $B$  assume um valor basicamente constante.

Figura 5: Saturação do Campo Magnético



Fonte: JU Lee *et al.* Ising-Type Magnetic Ordering in Atomically Thin FePS<sub>3</sub>. *Nano Letters* 10.1021/acs.nanolett.6b03052 (2016).

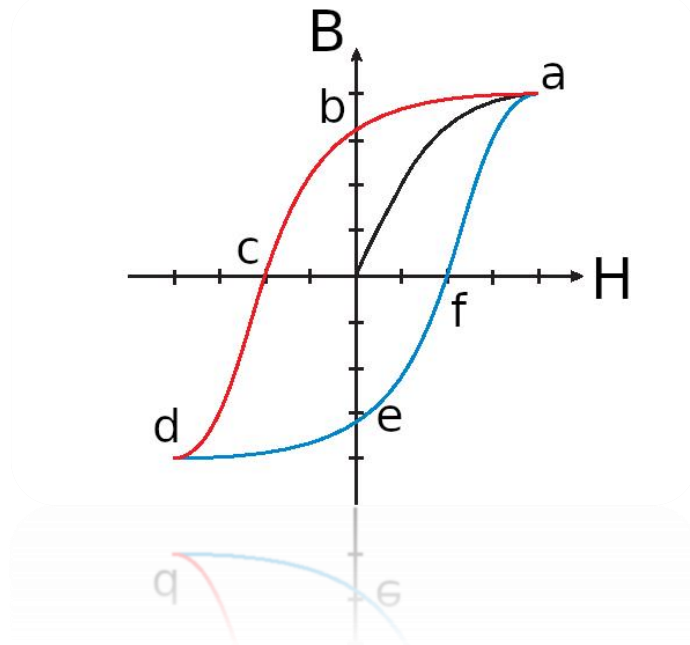
#### *Imantação*

- Embora desenvolvido em nível atômico, o processo de alinhamento dos dipolos de materiais ferromagnéticos é um processo mecânico. Esta forma consome energia no processo e, após a remoção do campo magnético externo, o material pode manter a orientação restante do dipolo muitas vezes. Ou seja, o material se torna um ímã.
- Se considerarmos a imantação (Campo Magnético residual), o gráfico da figura 5 se torna o gráfico da figura 6:



Outra característica muito importante dos materiais ferromagnéticos é a capacidade de seguir mudanças repentinas no campo  $H$ . Se os dipolos do material precisarem de tempo para se orientar, eles não serão capazes de acompanhar as mudanças rápidas no campo  $H$ . Componentes que funcionam em altas frequências requerem materiais de núcleo para se adaptarem às rápidas mudanças no campo  $H$ .

Figura 6: Imantação



Fonte: <https://mundoeducacao.uol.com.br/fisica/histerese-magnetica.htm>

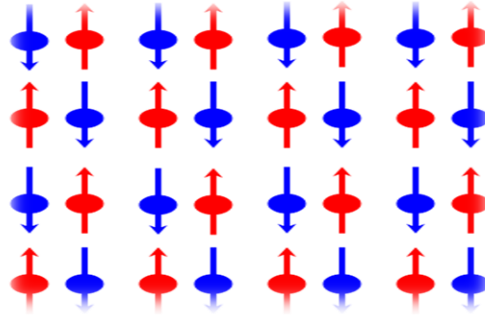
#### 2.3.4 Antiferromagnético e Ferrimagnético

Segundo Padilha (2000) o comportamento antiferromagnético é apresentado por alguns materiais, sendo que o protótipo é o óxido de manganês ( $MnO$ ). O  $MnO$  é um material cerâmico com caráter iônico e a sua estrutura cristalina é CFC do tipo  $NaCl$ . O momento magnético associado aos íons  $O^{2-}$  é zero. Os íons  $Mn^{2+}$  apresentam momento magnético permanente, mas eles estão arranjados na estrutura de modo que os íons adjacentes têm momentos opostos ou antiparalelos. O material como um todo não apresenta momento magnético.

Os materiais antiferromagnéticos apresentam temperatura crítica denominada temperatura de Néel ( $\theta_n$ ). Os momentos de dipolo só desaparecem nessa temperatura. Na presença de um campo magnético externo, alinham-se na direção e no sentido do campo aplicado, apresentando valores reduzidos e positivos de susceptibilidade magnética esta no intervalo 0 (zero) e  $10^{-2}$  (CULLITY, 2009).

O sentido da magnetização depende da ordem de spin dessas sub-redes. por exemplo, existem duas sub-redes A e B. Para fazer a magnetização zero, é necessário a direção de (A) é antiparalela à direção do spin de (B).

Figura 7: Ordenamento Antiferromagnético



Fonte: <https://saense.com.br/2017/01/a-comprovacao-experimental-do-magnetismo-bidimensional-do-tipo-ising/>

As substâncias Antiferromagnéticas são geralmente cerâmicas e feitas com metais de transição. Abaixo temos exemplos de materiais antiferromagnéticos:

Tabela 3: Materiais Antiferromagnéticos

Materiais Antiferromagnéticos	
MnO	Óxido de Manganês
MnF <sub>2</sub>	Fluoreto de Manganês
FeO	Óxido de Ferro
NiO	Óxido de Níquel
CoO	Óxido de Cobalto

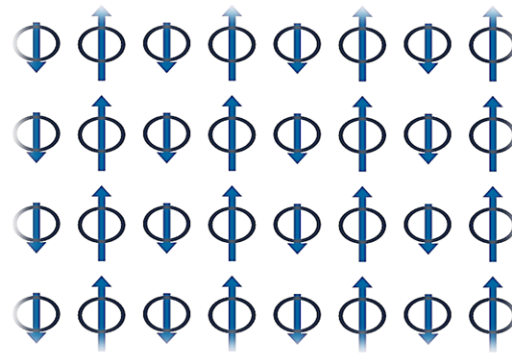
Fonte: Autor (2020)

A susceptibilidade magnética acima de TN estabelece-se a lei de Curie o interessante é que esses materiais em baixas temperaturas assumem o comportamento de supercondutores, ou seja, material de resistência nula podendo transmitir corrente elétrica sem houver a perda de energia.

Já as substâncias Ferrimagnéticas são compostas constituídas por íons distintos, que possui momentos de dipolos permanentes e com um alinhamento antiparalelo e desigual. Na presença de um campo magnético externo alinham-se na direção e sentido do campo aplicado, desaparecendo na temperatura de Curie, e apresenta valores altos e positivos de susceptibilidade magnética:  $10^{-2} < \chi < 10^6$  (CALLISTER, 2004).

O Ferrimagnetismo é a propriedade magnética de materiais com momentos atômicos alinhados em direções opostas.

Figura 8: Ordenamento Ferrimagnético



Fonte: <https://saense.com.br/2017/01/a-comprovacao-experimental-do-magnetismo-bidimensional-do-tipo-ising/>

Materiais magnéticos ferrosos naturais são conhecidos normalmente composta de ferrita, a mais famosa é a magnetita  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , porque é um mineral natural em muitas partes da terra. Entre os materiais ferrimagnéticos temos o ferrite que é utilizado para aumentar a permeabilidade magnética de um componente.

As permeabilidades magnéticas compostas pelas ferritas podem variar muito de um tipo para outro, intercalando de 10 a quase 20.000 ou mais. É importante consultar a folha de dados da ferrita para acessar este e outros dados importantes dos parâmetros, como impedância em certas faixas de frequência, temperatura de operação e sua resistência.

Figura 9: Ferrite.



Fonte: <https://www.magnamagnets.com/permanent-magnets/ferrite-magnets/>

## 3 A TERMODINÂMICA DO MAGNETISMO

O estado de um sistema termodinâmico é especificado pelos valores de certas grandezas *messuráveis experimentalmente* chamadas *variáveis de estado*<sup>1</sup>. Exemplo dessas variáveis no magnetismo são, magnetização de materiais magnético, o campo magnético externo aplicado a uma amostra, a temperatura e o volume que ocupa os materiais magnéticos. Essas propriedades podem ser estudadas através do elo de ligação entre elas e as propriedades termodinâmicas, como energia interna ou livre, entropia e o calor específico.

Nesse capítulo discutiremos a Termodinâmica de materiais magnético e faremos uma ligação com o Ferromagnetismo.

### 3.1 A Termodinâmica como um Ciência

A palavra *Termodinâmica* deriva do grego *thermè* (significa calor) e *dynamis* (significa força). Sua origem veio das bases científicas da tecnologia associada com princípios da revolução industrial no fim do século XVIII, primeiramente como um resultado de tentativas de melhorar a eficiência de máquinas a vapor, dispositivos nos quais há uma alimentação na forma de calor e cujo produto é o trabalho mecânico. Assim, como o nome sugere, a termodinâmica se referia a conceitos térmicos bem como a conceitos mecânicos, ou seja, dinâmicos. Portanto, a Termodinâmica é uma ciência experimental, baseada em um pequeno número de princípios (ou Leis), que são generalizações feitas a partir da experiência.

Com o desenvolvimento da matéria e o entendimento mais pleno de suas leis básicas, seu alcance e seus objetivos tornaram-se mais amplos. São usados agora por engenheiros no projeto de combustão interna, usinas geradoras convencionais e nucleares, sistemas de refrigeração e condicionamento de ar, e sistemas de propulsão de foguetes, mísseis, aviões e veículos terrestres. A ciência da Físico-Química, consiste, em grande medida, em aplicações de princípios termodinâmicos à química e ao equilíbrio químico. A produção de temperaturas extremamente baixas, na vizinha do zero absoluto, envolve a aplicação de princípios termodinâmicos a sistemas de ímãs moleculares e nucleares. A teoria da comunicação, a teoria da informação e mesmo certos processos biológicos são exemplos das vastas áreas em que o modo termodinâmico de raciocinar é aplicável.

A Termodinâmica diz respeito somente a propriedades macroscópicas ou de grande escala da matéria, e não faz hipótese sobre a estrutura de pequena escala ou microscópica da matéria. Dos princípios da termodinâmica podem-se derivar relações geral entre grandezas como o coeficiente de expansão térmica, de compressão,

capacidades térmicas específicas (ou calores específicos), calor de transformação, e coeficientes magnéticos e dielétricos, e especialmente como estes são afetados pela temperatura. Os princípios da termodinâmica também nos dizem quais as poucas relações entre estas devem ser experimentalmente determinadas para que todas as propriedades do sistema sejam completamente especificadas.

Os valores adquiridos por grandezas como as acima referidas só podem ser calculadas com base em um modelo molecular. A teoria cinética da matéria aplica as leis da mecânica às moléculas individuais de um sistema, e, possibilidade, por exemplo, o cálculo do valor numérico da capacidade térmica específica de um gás, e compreensão das propriedades dos gases em termos da lei de força entre moléculas individuais.

A abordagem da Termodinâmica Estatística (ou Física Estatística) ignora a consideração detalhada de moléculas como indivíduos e aplica considerações estatísticas para encontrar a distribuição, nos estados de energia do sistema, do grande número de moléculas que constituem uma porção macroscópica da matéria. Para os sistemas, cujos estados de energia podem ser calculados pelos métodos da Mecânica Quântica (Teorias de Schrödinger ou de Heisenberg) ou da Mecânica Clássica (de Newton, Hamilton ou Lagrange), tanto os valores das grandezas acima mencionadas como as relações entre elas podem ser determinadas por meio perfeitamente gerais. Os métodos da Termodinâmica Estatística dão maior discernimento dos conceitos de entropia e do princípio do aumento da entropia. A Termodinâmica é complementar da Teoria Cinética e da Termodinâmica Estatística. A termodinâmica fornece relações entre propriedades físicas de qualquer sistema, desde que certas medidas sejam realizadas. A Teoria Cinética e a Termodinâmica Estatística permitem calcular as magnitudes dessas propriedades para os sistemas cujos estados de energia podem ser determinados.

### 3.2 A Termodinâmica de Materiais Magnéticos

Uma das aplicações mais importantes da Termodinâmica é o estudo do comportamento de materiais magnéticos a temperaturas finitas. Se  $\mathbf{M}$  é a magnetização de um determinado material magnético por unidade de volume, a densidade de fluxo magnético  $\mathbf{B}$  é

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}), \quad (3-1)$$

e portanto, podemos definir o trabalho na forma,

$$dW = -\mu_0 V H dH - \mu_0 V H dM \quad (3-2)$$

onde  $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$  henry/m. Na equação (3-2), o primeiro termo do segundo membro é o trabalho que seria necessário para aumentar o campo no vácuo, se o material não

estivesse presente, visto que em tal caso  $M$  e  $dM$  serão nulos. O segundo termo é, portanto, o trabalho associado à variação da magnetização do material e o momento magnético  $m$  de um exemplar de volume  $V$  é definido  $m = \mu_0 VM$ .

Os sistemas magnéticos de maior interesse em Termodinâmica são os sólidos magnéticos, cuja variação de volume em um processo pode ser desprezada, é para os quais o trabalho “ $PdV$ ” é desprezível se comparado com  $-Hdm$ . Tais sólidos tem energia interna  $U$  e uma energia potencial magnética definida de (3-2) por uma relação  $E_p = -\mu_0 HM$ . Portanto de acordo com a segunda lei da Termodinâmica.

$$\begin{aligned} TdS &= dU + dW \\ &= dU - \mu_0 VHdH - Hdm \end{aligned} \quad (3-3)$$

e se a energia total é definida por

$$E = U + E_p = U - \mu_0 VHdH - Hdm. \quad (3-4)$$

Portanto, em termos de  $E$ .

$$TdS = dE + mdH \quad (3-5)$$

Se comparar com outras equações termodinâmicas podemos observar que a energia  $E$  é o análogo magnético da entalpia  $H$  de um sistema PVT, e alguns autores a denominam entalpia magnética e a representam por  $H^*$ . A energia total magnética na maioria dos sistemas de interesse (não existe variação de campo magnético) é definida como

$$E = U - Hm. \quad (3-6)$$

Na equação (3-6) o termo  $-Hm$  é a energia potencial magnética em um campo magnético externo conservativo, e é uma propriedade conjunta desse tipo para o produto PV (no sistema PVT). Assim, a correspondência entre a entalpia  $H = U + PV$  é uma analogia matemática somente. Mas como as equações têm a mesma forma, podemos estendê-la a todas as equações previamente deduzidas para a entalpia  $H$ , substituindo  $H$  por  $E$ ,  $V$  por  $-m$  e  $P$  por  $H$ .

Assim, a capacidade térmica a  $H$  constante, correspondente a  $C_p$  é

$$C_H = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_H \quad (3-7)$$

e a capacidade térmica a  $M$  constante (correspondente a  $C_v$ ) é

$$C_M = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_M \quad (3-8)$$

Outro potencial termodinâmico importante, além da entalpia  $H$ , é a energia livre de Helmholtz definida pela relação  $F = E - TS$ . Calculando o diferencial da energia livre obtém-se:

$$dF = dE - TdS - SdT. \quad (3-9)$$

e, usando a equação (3-5), temos

$$dF = -TdS - SdT - mdH. \quad (3-10)$$

Portanto,

$$\left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_H = -S, \quad \left( \frac{\partial F}{\partial H} \right)_T = -M. \quad (3-11)$$

Métodos de Termodinâmica Estatística, conduzem diretamente a uma expressão para a energia livre em função da temperatura  $T$  e campo magnético  $H$ . Então da segunda equação de (3-7), podemos encontrar  $m$  em função de  $T$  e  $H$ , que é a equação magnética de estado do sistema. A primeira equação de (3-7) fornece a entropia  $S$  em função de  $T$  e  $H$ . A energia  $E$  é encontrada, a partir da equação de Helmholtz,

$$E = F + TS \quad (3-12)$$

e a energia interna  $U$  é

$$E = E + Hm \quad (3-13)$$

Assim, todas as propriedades do sistema podem ser encontradas da expressão de  $F$  como função de  $T$  e  $H$ . A dependência da entropia para com a intensidade magnética pode ser determinada pelo método usado para deduzir as relações de diferenciabilidade de Maxwell,

$$\left( \frac{\partial S}{\partial H} \right)_T = \left( \frac{\partial m}{\partial T} \right)_H \quad (3-14)$$

A equação (3-14) explica muito fenômenos magnéticos, por exemplo, para um sal paramagnético, que obedece a lei de Curie,  $(\partial m / \partial T)_H < 0$ , e a entropia decresce quando

a intensidade magnética aumenta. Outra questão é, de acordo com a “terceira lei da termodinâmica”, é estabelecido que todos os processos que têm lugar em um sistema condensado a  $T = 0\text{K}$  efetuam-se sem variação de entropia. Esses processos incluem o aumento na intensidade magnética em um cristal paramagnético, segue-se que a  $T = 0\text{K}$ ,

$$\left(\frac{\partial S}{\partial H}\right)_T = 0. \quad (3-15)$$

Na seção seguinte, a termodinâmica é usada para estudar um modelo simples de *material ferromagnético* (o tema discutido no capítulo 2) que é ponto de partida para estudos de materiais mais complexos.

### 3.3 O Modelo de Ising

Para construir uma teoria microscópica sobre transições de fase de materiais ferromagnéticos é interessante partir de um modelo que seja simples e que possui solução analítica exata. O modelo de Ising apresentado em 1925 por Ernet Ising é um desses modelos até hoje é discutido pela população acadêmica.

Nesta esta seção é discutido um pouco sobre o modelo de Ising.

#### 3.3.1 Ernest Ising

O Físico alemão *Ernst Ising* (1900-1998), filho do comerciante Gustav Ising e Thekia Löwe, nasceu em 11 de maio de 1900 em Colônia. Seu doutorado em Física foi obtido na Universidade de Hamburgo em 1927 na Alemanha como uma tese sugerida por Wilhelm Lenz em 1920. Nesta tese ele tinha como objetivo, estudar um dos fenômenos mais importantes da matéria condensada, o ferromagnetismo de momentos de dipolos localizados. O modelo inicial era bastante simples, uma cadeia linear de momentos de dipolos magnéticos  $\sigma_i$  interagindo com seus primeiros vizinhos  $\sigma_{i-1}$  e  $\sigma_{i+1}$  em que a energia era multiplicada pelo termo de acoplamento  $-J$ , onde os momentos pode estar orientado para cima ( $\uparrow$ ) ou para baixo ( $\downarrow$ ).

No caso de  $J > 0$  o alinhamento paralelo dos momentos é favorecido o que compete com a desordem imposta pela temperatura. Dessa competição era esperada uma temperatura crítica abaixo (ou acima) da qual haverá (não haverá) ordenamento de toda cadeia. Para desapontamento de Ising, e certamente o seu orientador, esse modelo não apresentou transição para uma fase ordenada em qualquer temperatura diferentes de zero. Entende-se esse desapontamento já que melhor teoria de magnetismo da época, a teoria do campo molecular de Pierre Weiss previa transições de fase em temperaturas não nula independente da dimensão do sistema. Hoje, diferentes autores com argumentos até relativamente simples, mostraram que a cadeia de momentos



magnéticos é instável em qualquer temperatura diferente de zero e seu ordenamento só acontece a temperatura  $T = 0K$ .

Figura 10: Enert Ising (1900 -1998).



Fonte: <https://www.alchetron.com/Ernst-Ising>.

O nome “Modelo de Ising” foi concebido em uma publicação de 1936 por Rudolf Ernst Peierls (1907-1995) com o título “On Ising’s of Ferromagnetism” no qual demonstra que a magnetização espontânea pode existir no caso bidimensional. Lars Onsager resolveu o modelo para duas dimensões na ausência de um campo magnético em 1944 e demonstrou a transição de fase. Sem nenhuma aproximação, a solução analítica tanto para duas como para três dimensões se torna impossível. Embora seja um problema em aberto, sabe-se que é possível provar a existência da magnetização espontânea a baixas temperaturas para os casos de duas e três dimensões.

O modelo de Ising não deve ser visto como um fracasso, ele é certo, simples e possui solução analítica. O erro de Ising em sua tese de doutoramento foi afirmar que os modelos em duas e três dimensões também não haveria transições de fase, o que está errado. Além disso, modelo de Ising é usado como referência em muitos trabalhos acadêmicos com grande sucesso em uma grande variedade de diferentes situações problemas, com mais de 12.000 (doze mil) publicações entre 1969 e 1997.

O modelo de Ising serviu como inspiração ao modelo de Werner Heisenberg (1901-1976) proposto em 1928, onde os spins são substituídos operadores matriciais de spin onde o caráter quântico foi incluído. O modelo de Heisenberg é ainda um dos modelos mais estudados pela tamanha sofisticação que em determinadas situações volta-se a formulação mais simples de Ising, que com o tempo ganhou generalidade e é abordado por técnicas refinadas, tanto em duas como em três dimensões.

Além do ferromagnetismo, o modelo de Ising também pode descrever outros sistemas físicos, como o gás de rede binária introduzido em 1952 por Yang e Lee

(YANG, 1952). O termo gás de rede a um modelo em que  $M$  átomos ocupam aleatoriamente os  $N > M$  sítios de uma rede. A cada par de sítios vizinhos ocupados atribui-se uma energia  $E_0$  e se um sítio faltar pelo menos um átomo atribui-se energia  $E = 0$ . A interação tem a forma do modelo de Ising, com os spins assumindo 0 (ausência de átomo) ou 1 (presença de átomo) e o Hidrogênio adsorvido em uma superfície (110) de ferro é o sistema protótipo.

Figura 11: Rudolf Ernst Peierls (1907-1995)



Fonte: Rudolf Peierls in 1966 (Wikipedia).

Já a liga binária existe em dois tipos de átomos ocupando aleatoriamente os sítios de uma rede. Dependendo se os vizinhos são do mesmo tipo (mesmo átomo) ou não se atribui energia diferente ao par. Neste caso 1 representa um tipo de átomo ocupado e -1 representa o outro tipo. O sistema protótipo é a liga cobre-zinco. Neste sentido existem generalizações naturais do modelo de Ising que são importantes em determinadas situações ao se descrever sistemas realistas. Por exemplo, as interações de longo alcance, spins com mais de dois valores e outros.

### 3.3.2 O Modelo de Ising: Caso Unidimensional

Considere um material ferromagnético unidimensional composto por  $N$  sítios de equilíbrio ocupados por momentos magnéticos (ou spins) distribuídos, Figura 8. A energia do sistema magnético é dada por,

$$H = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - H \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (3-16)$$

é uma variável aleatória que pode assumir valores  $\pm 1$  nos sítios  $i = 1, \dots, N$  de uma cadeia linear. O primeiro termo é a representa as energias de interação que devem ser capazes de produzir um estado ferromagnético ordenado (quando  $J > 0$ ). Já o segundo termo, envolve a interação entre o campo externo  $H$  e o sistema de spins, tem um caráter puramente paramagnético. A equação (4-14) é o modelo de Ising unidimensional de um material ferromagnético.

Como a variável de spin é aleatória ela deve satisfazer na termodinâmica estatística o uma distribuição de Boltzmann,

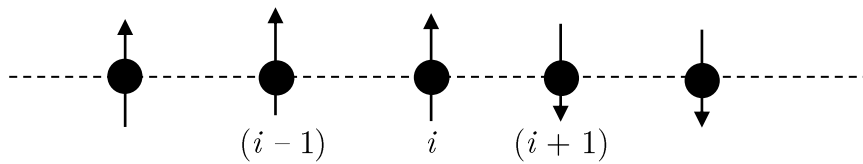
$$P = \frac{\exp(-\beta H)}{\sum_{\{\sigma_i\}} \exp(-\beta H)} \quad (3-17)$$

onde

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(-\beta H) \quad (3-18)$$

é chamada de função de partição na termodinâmica estatística. Conhecida a função de partição é possível calcular a energia livre de Helmholtz (3-10) pela relação  $F = \ln(Z)$  e as funções termodinâmicas do material podem ser determinadas em função de  $H$  e  $T$ .

Figura 12: cadeia Linear de spins.



Fonte: Autor.

A função de partição (3-14) é dada por,

$$Z = \sum_{\sigma_i} \exp \left\{ K \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{L}{2} \sum_{i=1}^N (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right\} \quad (3-20)$$

onde  $K = \beta J$  e  $L = \beta H$  e o segundo termo foi escrito de maneira mais simétrica. Por conveniência vamos admitir a condição de contorno  $\sigma_N = \sigma_{N+1}$ . Agora é interessante escrever a função de partição na forma matricial,

$$Z = \sum_{\sigma_i} \prod_{i=1}^N \mathbf{T}\{\sigma_i, \sigma_{i+1}\} \quad (3-21)$$

onde

$$\mathbf{T}\{\sigma_i, \sigma_{i+1}\} = \exp \left\{ K \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{L}{2} \sum_{i=1}^N (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right\} \quad (3-22)$$

que pode ser escrita na forma matricial (matriz 2x2) indexada pelos valores das variáveis de spin  $\sigma_i = \pm 1$  e  $\sigma_{i+1} = \pm 1$ . Portanto, a matriz de transferência pode ser escrita como

$$\mathbf{T}\{\sigma_i, \sigma_{i+1}\} = \begin{bmatrix} T(+, +) & T(+, -) \\ T(-, +) & T(-, -) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \exp\{K + L\} & \exp\{-K\} \\ \exp\{-K\} & \exp\{K - L\} \end{bmatrix} \quad (3-23)$$

Utilizando o formalismo matricial é fácil perceber que a equação (3-21) pode ser interpretada como traço do produto de  $N$  matrizes de transferências idênticas

$$Z = \text{Tr}\{\mathbf{T}\}^N. \quad (3-24)$$

Usando a identidade,  $\mathbf{U}\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{I}$ , onde  $\mathbf{I}$  é a matriz identidade,

$$Z = \text{Tr}\{\mathbf{U}^{-1}\mathbf{U}\mathbf{T}\mathbf{U}^{-1}\mathbf{U}\}^N = \text{Tr}\{\mathbf{U}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{U}\}^N = \text{Tr}\{\mathbf{D}\}^N \quad (3-25)$$

onde  $\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^\dagger$  (inversa igual a transposta) e  $\mathbf{D}$  é uma matriz diagonal, ou seja, (3-23) é diagonalizável. Os autovalores de (3-25) podem ser determinados de forma simples, usando a equação secular  $(\mathbf{T} - \lambda\mathbf{I}) = 0$ ,

$$Z = \text{Tr}\{\mathbf{D}\}^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (3-26)$$

obtendo,

$$\lambda_{1,2} = e^K \cosh L \pm [e^{2K} \cosh^2 L - 2\sinh(2K)] \quad (3-27)$$

É fácil perceber que esses dois autovalores são positivos  $\lambda_1 > \lambda_2$  (exceto no ponto trivial,  $H = 0$  e  $T = 0$ ). No caso de campos nulos essa expressão fica mais simples  $\lambda_1 = 2 \cosh K \geq \lambda_2 = 2 \sinh K$  com a degenerescência ( $\lambda_1 = \lambda_2$ ) no limite de temperatura nula ou campos infinitos. Para obter a energia livre no limite termodinâmico, é conveniente reescrever a equação (3-26) na forma,

$$Z = \lambda_1^N \left[ 1 + \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right] \quad (3-28)$$

Como  $\lambda_1 > \lambda_2$  no limite termodinâmico, a energia livre é obtida de,

$$\begin{aligned} F(H, T) &= -\beta^{-1} \ln Z^N \\ &= -\beta^{-1} \ln \left\{ \lambda_1^N \left( 1 + \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right) \right\} = -N\beta^{-1} \ln \lambda_1 \end{aligned} \quad (3-29)$$

ou na forma,

$$F(H, T)/N = -\beta^{-1} \ln e^{\beta L} \cosh(\beta L) + \sqrt{e^{2\beta J} \cosh^2(\beta H) - 2\sinh(2\beta J)} \quad (3-30)$$

Que é uma função analítica para a energia livre de Helmholtz e permite obter todas as propriedades termodinâmicas do sistema.

A magnetização por spin é dada por

$$m(T, H) = - \left( \frac{\partial f}{\partial H} \right)_T = \frac{\sinh(\beta H)}{\sqrt{\sinh^2(\beta H) + \exp(-4\beta J)}} \quad (3-31)$$

Que se anula para  $H = 0$ , mostrando que o modelo não explica o ferromagnetismo, A partir da entropia por spin, podemos calcular o calor específico a campo constante. A campo nulo, o calor específico é dado por

$$c_N/k_B = (\beta J)^2 [\operatorname{sech}(\beta J)]^2 \quad (3-32)$$

que é uma função bem-comportada, exibindo apenas um máximo achatamento em função da temperatura.

Há um argumento atribuído a Landau para mostrar que não existe um estado ordenado (e, portanto, uma transição de fases) num sistema unidimensional com interações de curto alcance. Por exemplo, a cadeia de Ising no estado fundamental, na ausência de campo magnético, com todos os spins positivos. Para criar dois domínios diferentes, basta inverter o sinal de todos os spins a partir de um determinado ponto. Isso causaria uma energia muito pequena,  $2J > 0$ . No entanto haveria um aumento de entropia muito grande ( $S = k_B \ln N$ ), pois a parede entre os domínios teria a possibilidade de ser colocada em  $N$  posições distintas. A temperatura finita, a energia livre do modelo sofreria uma variação que poderia tornar negativa para valores suficientemente grandes de  $N$  com  $T \neq 0$ . Como a energia livre diminui, há uma tendência de criação de domínios que impediria a estabilidade de qualquer fase ordenada.

## 4. SIMULAÇÃO DE UM MATERIAL FERROMAGNÉTICO

As simulações computacionais de materiais, aliadas com o desenvolvimento de algoritmos mais eficientes e o avanço tecnológico na área da computacional, permitem que atualmente diversas demandas sejam tratadas detalhadamente num nível microscópico de forma muito precisa e “rápida”. Elas podem fornecer informações sobre situações nas quais resultados analíticos não podem ser obtidos, ou ainda, nas quais dados experimentais não são viáveis (ou os dados são escassos), sendo portanto de grande importância para predições de novos fenômenos. Além disso, as simulações têm um papel fundamental para auxiliar na interpretação de resultados experimentais e teóricos, obtidos de métodos físico-matemático. A simulação não tem o objetivo de substituir o experimento ou a teoria e sim complementar seus conceitos.

Nesse capítulo, faremos uma simulação de Monte Carlo (MC) de um modelo Ferromagnético bidimensional, *a rede quadrada*.

### 4.1 Objetivos da Simulação Computacional

Hoje em dia existe uma técnica muito importante de tratar multidões ou sistemas de muitos corpos que é a simulação computacional. Os livros de ALLEN e TILDESLEY e RAPPORT e LANDAU são referências básicas neste assunto. Uma área de grande interesse que se beneficia das simulações é o estudo de sistemas físicos à temperaturas finitas (diferente do zero absoluto). Dessa maneira pode-se estudar situações nas quais se deseja entender o comportamento de sistemas em uma dada temperatura, como por exemplo para entender a transição de fase ferromagnética. Também pode usar as simulações para fazer a amostragem do espaço de fase e gerar configurações “características” de sistemas desordenados, como líquidos ou amorfos.

A simulação computacional fornece resultados exatos para modelos, a menos de erro estatístico. Este erro é ocasionado pelas limitações computacionais, a memória que limita o tamanho do sistema ou o número de moléculas envolvida na simulação, e a CPU (CPU, unidade de processamento de dados) que limita o tempo de observação ou o número de passos da simulação. Hoje esse erro pode ser controlado ao ponto de ter magnitude de erros experimentais.

Hoje em dia existem duas técnicas para estudar populações muito eficientes, a dinâmica molecular (DM) e o Monte Carlo (MC) implementados em diferentes algoritmos clássicos ou quânticos. No MC a amostragem das configurações é “estocástica” ou aleatória e na DM é “determinística”. Na Dinâmica Molecular, o foco principal é o

estudo do comportamento de sistemas em função do tempo. Assim, por meio da integração das equações de movimento para um sistema, determinam-se as propriedades de equilíbrio ou de transporte que o caracterizam. O conceito da Dinâmica Molecular foi proposto por ALDER e WAINWRIGHT (1959) para simular o comportamento dinâmico de sistemas moleculares. A base teórica da DM engloba vários dos importantes resultados produzidos por L. Euler, J. W. Hamilton, J. L. Lagrange e I. Newton discutido por RAPAPORT (1996).

Neste método, a partir da energia de interação, as forças que atuam sobre as partículas são calculadas e as equações de movimento são resolvidas para um certo intervalo de tempo. Neste processo, as posições sucessivas são calculadas através de algoritmos e novas configurações são geradas. Na Dinâmica Molecular, os átomos se movem em trajetórias geradas a partir da integração das equações de movimento, e as propriedades observáveis são obtidas através de médias temporais sobre as trajetórias dos átomos.

Já o processo estocástico para gerar configurações, é implementado no método de MC. Neste método, as posições são selecionadas aleatoriamente e novas configurações são geradas, de tal forma a satisfazerem distribuições de probabilidades de Gibbs. A introdução do método de Monte Carlo é atribuída a Metropolis e outros. Todos os métodos que resolvem problemas físicos ou matemáticos usando o que se chama de procedimento Monte Carlo, se valem, no fundo, do fato de ter-se à disposição um conjunto muito grande de números aleatórios cuja distribuição de probabilidade é conhecida. Em alguns casos, usa-se um conjunto de números previamente gerados dispostos em uma tabela, em outros casos eles são gerados por funções geradoras de números aleatórios no computador (com as sub-rotinas RAN ou RAN2). Neste último caso, gera-se uma sequência de números usando rotinas matemáticas, os números gerados dessa forma são na verdade "pseudoaleatórios". Na matemática estes números são muito úteis, por exemplo, para calcular algumas constantes matemáticas e, principalmente, para avaliar integrais numéricas no espaço  $n$ -dimensões, em particular quando  $n \gg 1$ . Em Física, eles são usados para gerar configurações no espaço de fase e obter propriedades estruturais e termodinâmicas de sólidos e líquidos.

Neste TCC é escolhido o método de MC como ferramenta para estudar as propriedades termodinâmica e material ferromagnético.

## 4.2 O Método de Monte Carlo

Como foi dito na seção anterior o método de MC é uma forma alternativa resolver problemas físicos importantes do ponto de vista computacional. Ele pode ser implementado em diferentes linguagens como Fortran 95 (ou HPF), o C/C++, em Python ou ainda MatLab (ou em sua forma livre OCTAVE).

### 4.2.1 O Software MATLAB

O MATLAB (abreviatura par MaTriX LABoratory – Laboratório de Matrizes) é um programa de computador especializado e otimizado para cálculos científicos e de Engenharia. Inicialmente ele foi projetado para cálculo com matrizes; ao longo dos anos, transformou-se em um sistema computacional flexível, capaz de resolver inúmeros problemas técnico e científico. Ele implementa a linguagem de programação de mesmo nome, juntamente com uma vasta biblioteca de funções predefinidas que torna as tarefas de programação uma técnica mais fácil e eficiente. Além disso, o MATLAB tem muitas vantagens, em comparação com linguagens computacionais convencionais (C++, Fortran e Python), entre elas podemos citar: Facilidade de uso, independência da plataforma, funções predefinidas diagramações independentes de dispositivos e interface gráfica de usuário.

Esse software possui recursos visuais que são simples em comparação a outras linguagens de programação. Isso é um diferencial quando se precisa de um resultado imediato e não tem tempo de desenvolver algo do 0. Hoje em dia existem diversas bibliotecas (toolboxes) na qual pode ser utilizado em distintas áreas, como equações diferenciais, estatística, processamento de sinais, finanças etc. Sendo possível também utilizar os recursos gráficos para visualizar os resultados em 2D e 3D na forma de animações/vídeos.

O Matlab tem diversas capacidades, sendo:

- Análise de dados;
- Gráficos;
- Desenvolvimento de algoritmos;
- Criação de aplicativos;
- Podendo ser usado em outra língua;
- Matlab na nuvem;
- Hardware;
- Computação paralela;
- Implantação de Web e Desktop;

Segundo Fereguetti (2019) utilizar esse software não é tão simples, ele está disponível para distintos sistemas operacionais (Windows, Linux, Mac) para utilizar uma função na qual não conhece, basta jogar o que precisa no Google (exemplo: gráfico 3D no matlab) onde vai se encontrar inúmeros tutoriais de como usar o programa.

Neste capítulo, usamos algumas funções do MATLAB para implementar o método de MC Metrôpoles para estudar a termodinâmica de um material ferromagnético bidimensional (2D), “a rede quadrada” de spins.



### 4.2.2 O Algoritmo de Metropolis

Um algoritmo usado no método de MC é o “algoritmo de Metropolis” que foi introduzido por Metropolis e colaboradores em 1953. Nesse algoritmo as configurações são geradas de acordo com a distribuição de Boltzmann (ou Gibbs), efetuando uma sequência de sorteios aleatórios de transições entre estados, garantindo que a configuração final seja a de equilíbrio. A taxa de transição entre dois estados  $i$  e  $j$  satisfazem o princípio do balanço energético e são escolhidas de modo a permitir que as configurações mais prováveis tenham mais chance de ocorrer na média das grandezas de interesse, isto é, restringindo a busca a um subconjunto de configurações estacionárias que são energeticamente favoráveis.

O algoritmo de Metropolis é construído a partir da relação,

$$P_{i \rightarrow j} = \exp \left[ -\frac{E_j - E_i}{k_B T} \right] \quad (4-1)$$

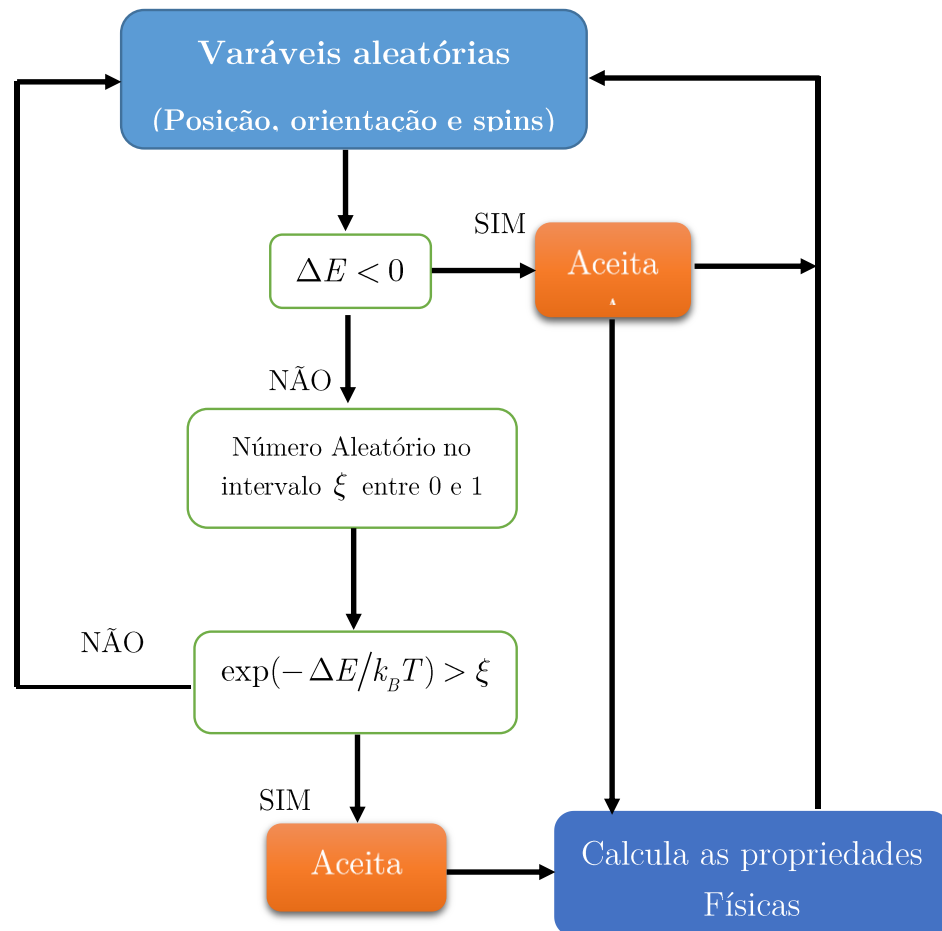
onde  $E_i$  e  $E_j$  são respectivas energia dos estados de  $i$  e  $j$ . Vamos considerar um modelo discreto definido por uma rede de  $N$  sítios. Um estado coletivo do sistema é representado como  $m = S_i$ , onde  $S_i$  designa o estado de variável  $i$ . O procedimento a seguir ilustra as ideias do MC implementado no algoritmo de Metropolis:

- a) Gera a configuração inicial  $m = S_{i_m}$ ;
- b) Em seguida geramos uma nova configuração, obtida de  $m = S_{i_m}$ ,  
 $m = S_{i_{m+1}}$
- c) Calcula-se a energia  $\Delta E = E_{m+1} - E_m$
- d) Se  $\Delta E < 0$ , a antiga configuração é substituída pela nova;
- e) Se  $\Delta E > 0$ , a mudança pode ser aceita com probabilidade  $p = \exp(-\Delta E/k_B T)$ . Calcula então a probabilidade  $p$  e geramos um número aleatório  $\xi$  uniformemente distribuído no intervalo entre 0 (zero) e 1 (um), de modo que se,  $\xi \leq p$  a mudança é aceita e a nova configuração será gerada;
- f) Se  $\xi > p$ , a configuração continuará a mesma, retorna-se ao item (c), repetindo o procedimento.

Após um número suficientemente grande de repetições, uma cadeia de Markov é gerada, obtendo a condição de balanço detalhado e a hipótese de ergodicidade. Dessa

forma, a convergência para o estado detalhado é garantida. A ideia do algoritmo de Metropolis é ilustrado na figura.

Figura 13: Passos de Monte Carlo (MC) no Algoritmo de Metropolis.



Fonte: Autor.

Apesar da convergência estar garantida para o equilíbrio, segundo a condição de balanço detalhado e a ergodicidade do procedimento, as transições aleatórias que ocorrem durante o início da simulação partem de um estado arbitrário, de não equilíbrio. Dessa maneira, surge a necessidade, se descartar os primeiros passos da simulação, em outras palavras, as primeiras configurações para permitir que o sistema entre em equilíbrio antes que as medidas das quantidades sejam realizadas, possibilitando boas estimativas da grandeza desejada.

#### 4.2.3 Números Pseudo-Aleatórios

Na simulação de MC utiliza-se o gerador de números aleatórios lineares congruentes, que gera números pseudoaleatórios rand do MATLAB que gera números entre 0 (zero) e 1 (um). Existem na literatura científica uma rejeição aos geradores

prontos por não serem satisfatório ou gastarem muito tempo de CPU. Alguns autores preferem implementar o gerador melhorar a eficiência dos cálculos.

#### 4.2.4 Médias de Propriedades Termodinâmicas

No MC a propriedades termodinâmicas são encontradas realizando cálculo das médias correspondentes a partir da função de partição do sistema. Se conhecido a energia de interação entre constituintes, spins no caso ferromagnético, a energia média é calculada pela dos passos aceitos no algoritmo de metropolis,

$$\langle E \rangle = \frac{1}{p} \sum_{t=1}^p E(t) \quad (4-2)$$

onde  $E(t)$  é a energia aceita e  $p$  é número passo aceitos que é a “energia interna” na termodinâmica. Conhecida a energia média (4-2) pode-se determinar o calor específico a partir da flutuação da energia magnética,

$$c/k_B = \frac{\sigma_E^2}{(k_B T)^2} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{(k_B T)^2}. \quad (4-3)$$

onde  $T$  é a temperatura absoluta e  $k_B$  é a constante de Boltzmann.

A susceptibilidade magnética é também uma grandeza muito própria para ser calculada por MC. Ela é definida com a derivada da magnetização em relação ao campo aplicado, no limite de campo zero,

$$\chi = \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{H=0} \quad (4-4)$$

Por um procedimento análogo asado para o calcular o calor específico e a variância da energia, pode-se mostrar a seguinte relação entre a susceptibilidade e a variância do momento magnético:

$$\chi = \frac{\sigma_m^2}{k_B T} = \frac{\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2}{k_B T} \quad (4-5)$$

Em simulação para essas grandezas é conveniente usar unidades reduzida para aumentar a eficiência computacional e o tempo de CPU, em vez de simular as propriedades acima usado  $k_B T$  é conveniente usar as vezes  $k_B T/J$  onde  $J$  é o termo de acoplamento no modelo de Ising. Portanto, as expressões acima mostram como a energia capacidade térmica e a susceptibilidade magnética podem ser calculadas a partir de uma simulação de MC.

### 4.3 O Modelo de Material Ferromagnético: A Rede Quadrada

Neste TCC estamos querendo estudar as propriedades termodinâmicas de um material ferromagnético 2D. A rede para esse fim é a “rede quadrada”. Na Tabela 4 representamos a inversão de um spin de  $\uparrow$  para  $\downarrow$  numa rede quadrada. Assumimos que cada sítio da rede representado na tabela pela associação com seus vizinhos, onde a seta  $\uparrow$  representa  $\sigma_i = +1$  e a seta  $\downarrow$  representa o spin  $\sigma_i = -1$ . O modelo de Ising com campo magnético externo é descrito por,

$$H = -J \sum_{i,j}^N \sigma_i \sigma_j - H \sum_i^N \sigma_i \quad (4-6)$$

onde  $J$ , o termo de acoplamento, é a energia de interação entre primeiros vizinhos e  $H$  representa o campo magnético externo. A primeira soma é realizada sobre os primeiros vizinhos  $(i,j)$ , a segunda soma sobre os  $N$  spins da rede e  $\sigma_i = \pm 1$ .

Para implementar a simulação de MC temos que estabelecer inicialmente o tipo de rede e o número de spins na rede. Usa-se geralmente a rede com condições periódicas de contorno, com intuito de eliminar efeitos de borda, permitido assim que todos os vizinhos tenham o mesmo número de spins. Cada sítio tem uma variável aleatória caracterizada por  $\sigma_i = \pm 1$ . A tabela 4.1 mostra as interações possíveis entre pares de spins numa rede quadrada onde o spin central foi invertido. O primeiro passo para a implementação é escolher a configura inicial do sistema. No nosso caso a configuração inicial é todos os spins alinhados para cima,  $+1$ . Devemos notar a energia de interação entre primeiros vizinhos, na ausência de campo magnético externo no modelo de Ising é:  $\uparrow\uparrow$  ou  $\downarrow\downarrow$  ( $E = -J$ );  $\uparrow\downarrow$  ou  $\downarrow\uparrow$  ( $E = +J$ ).

Tabela 4: Estados de spins da rede quadrada.

$\uparrow$	$\uparrow$
$\uparrow \uparrow \uparrow$	$\uparrow \downarrow \uparrow$
$\uparrow$	$\uparrow$

Fonte: Autor.

O modelo de Ising e suas múltiplas variantes, para uma rede quadrada, foi estudado analiticamente por Lars Onsager em 1964. No momento observou-se que no limite termodinâmico a integral da energia diverge para  $\cosh^2 2\beta J = 2\text{sen}2\beta J$  ou seja  $\text{sen}2\beta J = 1$  que define a temperatura crítica,

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2,268.$$

## 4.5 Resultados e Discussões

Nesta seção implementamos o modelo de Ising em Monte Carlo (MC) Metropolis no MATLAB par uma rede quadrada de um material ferromagnético (2D) levando em conta apenas interações entre primeiros vizinhos (interações de curto alcance). Fizemos simulação para  $H = 0$  e  $H = 0,6$  variando, em cada uma das situações o  $J$  (interações entre primeiros vizinhos) de 0,6 e 0,8. Nestas situações obtemos o comportamento da magnetização e de seu módulo, a susceptibilidade e o calor específico em função da temperatura reduzida (em termos da temperatura de Curie equação (4-7)) de 0,6 até 5,0 a temperatura de Curie.

*Situação para simulação de MC Metropolis:*

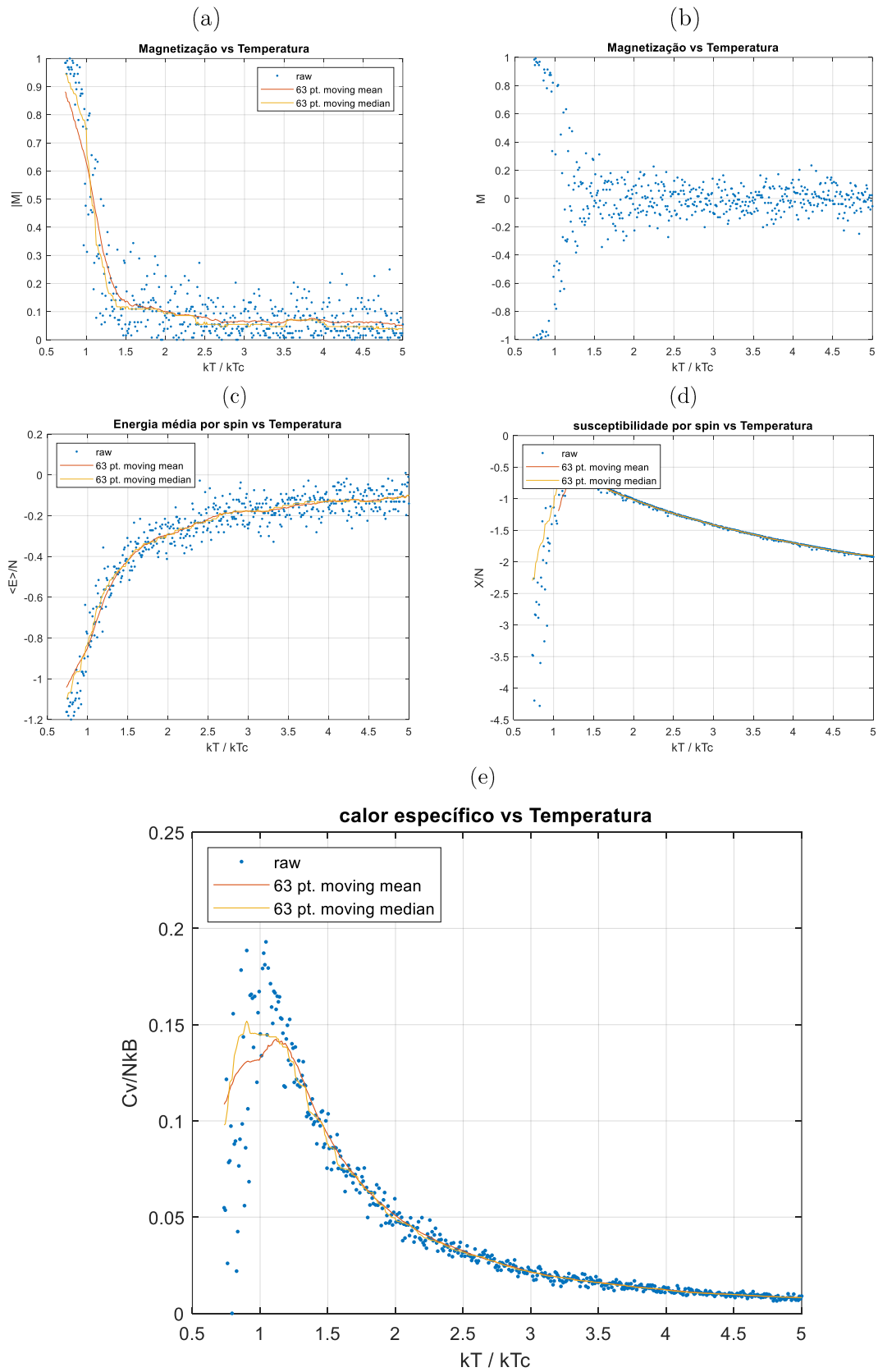
$H = 0:$	$J = 0,6$
	$J = 0,8.$
$H = 0,6;$	$J = 0,6$
	$J = 0,8.$

Na situação de campo nulo ( $H = 0$ ) observamos nas Figuras 14 (a) e 15(a) que o módulo da magnetização reduzida decai de 0,9 para um valor entorno de 0,1 próximo a temperatura crítica, o sistema leva claramente mais tempo para atingir o equilíbrio, já que as correlações entre os constituintes na região decaem de forma muito mais lenta, possuindo flutuações muito grandes. O sistema acima da temperatura de Curie considerada como 1.0 decai mais rapidamente e a magnetização oscila em torno do zero, como esperado, enquanto para temperatura abaixo da crítica o decaimento é também rápido, mas oscila em torno de valor diferente de zero, pois o sistema está ordenado. Note que como o sistema é finito a magnetização média é nula, de forma que calculamos o valor médio da magnetização, que nesse caso não é nula. Devemos observar nas Figuras 14(b) e 15(b) que quando iniciamos a simulação a partir da distribuição de spins para cima e para baixo igualmente prováveis, o sistema tem a probabilidade de magnetizar nas orientações para cima e para baixo. Então, por isso é mais interessante olhar para o valor absoluto da magnetização da mesma forma que olhamos para a energia como discutimos acima.

A energia magnética por spin nas Figuras 14(c) até 15(c), aumenta com a temperatura nas Figuras 14(c) até 15(c) a partir de um valor próximo de zero. Observe o ponto de inflexão em uma determinada temperatura, conhecida como *temperatura de Curie*, temperatura reduzida igual a unidade. Essa mudança significativa é conhecida como mudança de fase do material ferromagnético. Já a susceptibilidade, Figuras 14(d) e 15(d), tem um aumento acentuado acima da temperatura de Curie e decresce mais lentamente com a temperatura. Também observamos o calor específico em função da temperatura nas figuras 14(e) e 15(e), possuindo um máximo na temperatura de Curie e uma decréscimo acima dela. Na situação de campo nulo a energia de interação de

entre primeiros vizinhos não afeta significativamente as propriedades termodinâmica do material ferromagnético.

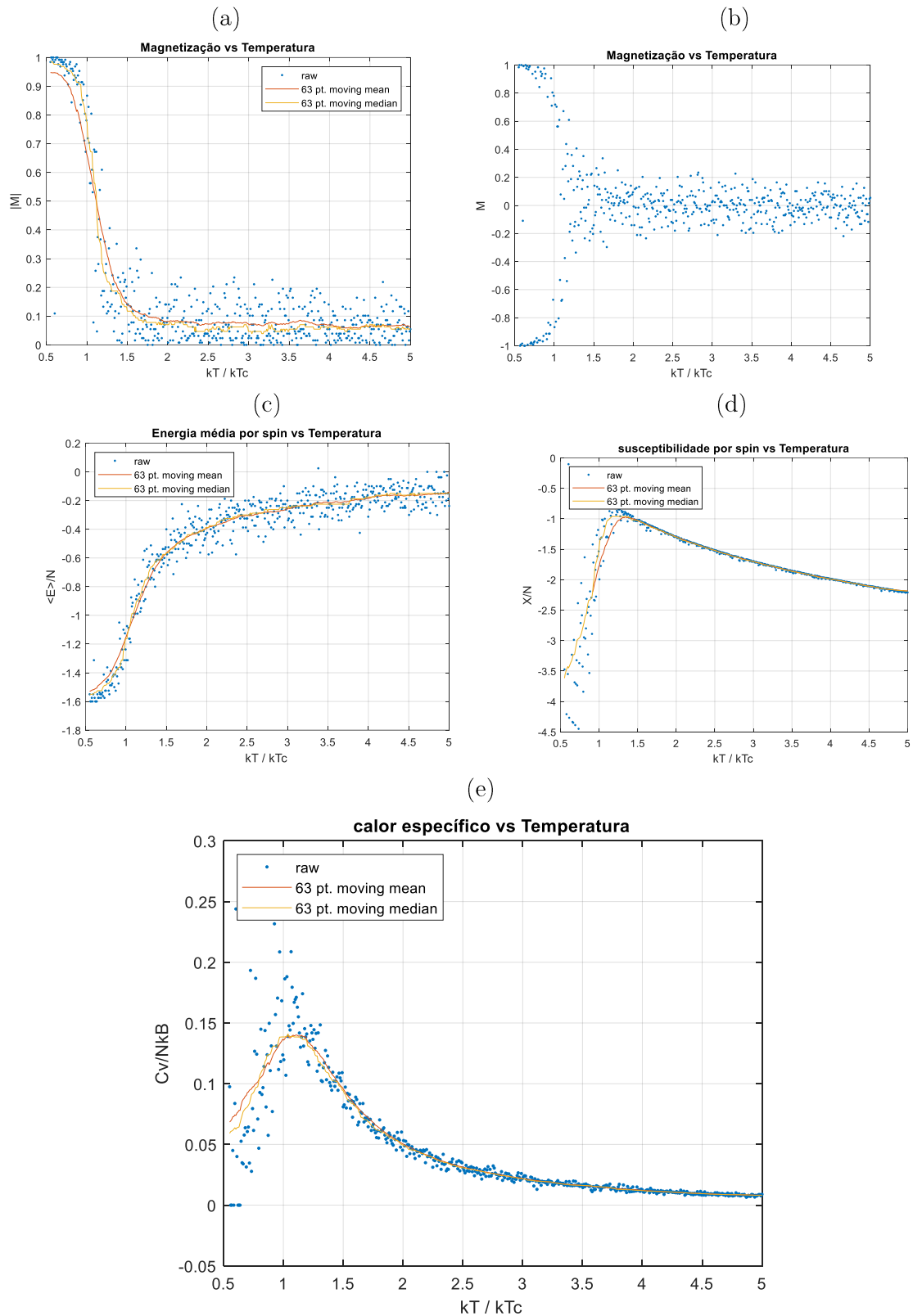
Figura 14: Simulação de MC ( $H = 0$ ;  $J = 0.6$ ).



Fonte: Autor.

A Figura 16 e 17 mostra o comportamento das propriedades ferromagnética com a temperatura de 0.6 até 5.0 vezes a temperatura de Curie com a aplicação do campo  $H = 0.6$  e  $J$  assumindo valores de 0.6 e 0.8.

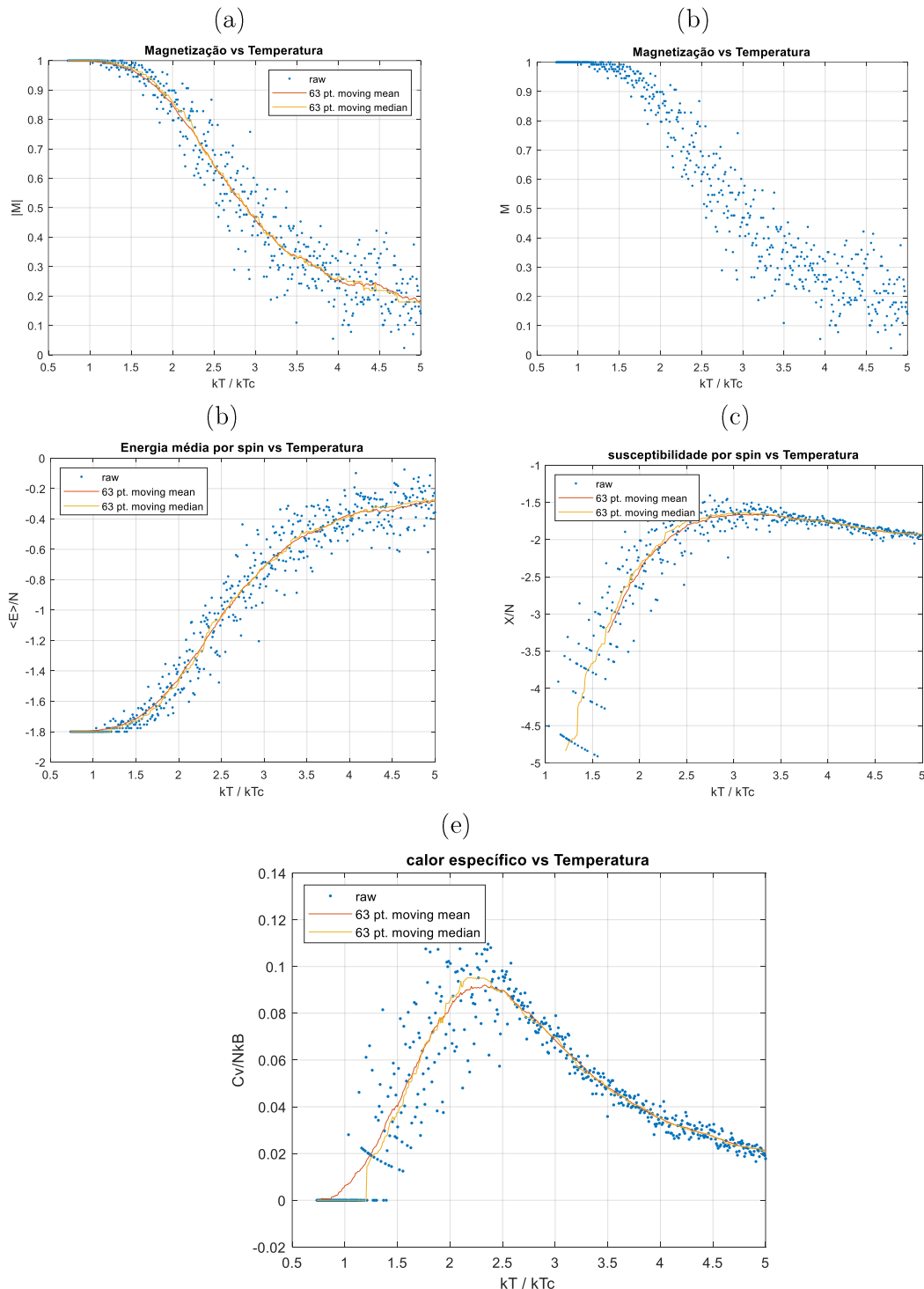
Figura 15: Simulação de MC ( $H = 0$ ;  $J = 0.8$ ).



Fonte: Autor.

O módulo e a magnetização, Figuras 16 e 17, (a) e (b), o decréscimo acontece a partir da temperatura de Curie e não apresenta flutuações de spins para baixo e para cima, privilegiando orientações para cima como um decréscimo acentuado com a temperatura que diminui mais lentamente o aumento do campo aplicado. A energia por spin, Figuras 16(c) e 17(c), podemos observar que seu mínimo passou de aproximadamente  $-1.0$  para aproximado de  $-1.8$  com o aumento do campo aplicado e não apresenta uma mudança acentuada em seu máximo.

Figura 16: Simulação de MC ( $H = 0.6$ ;  $J = 0.6$ ).

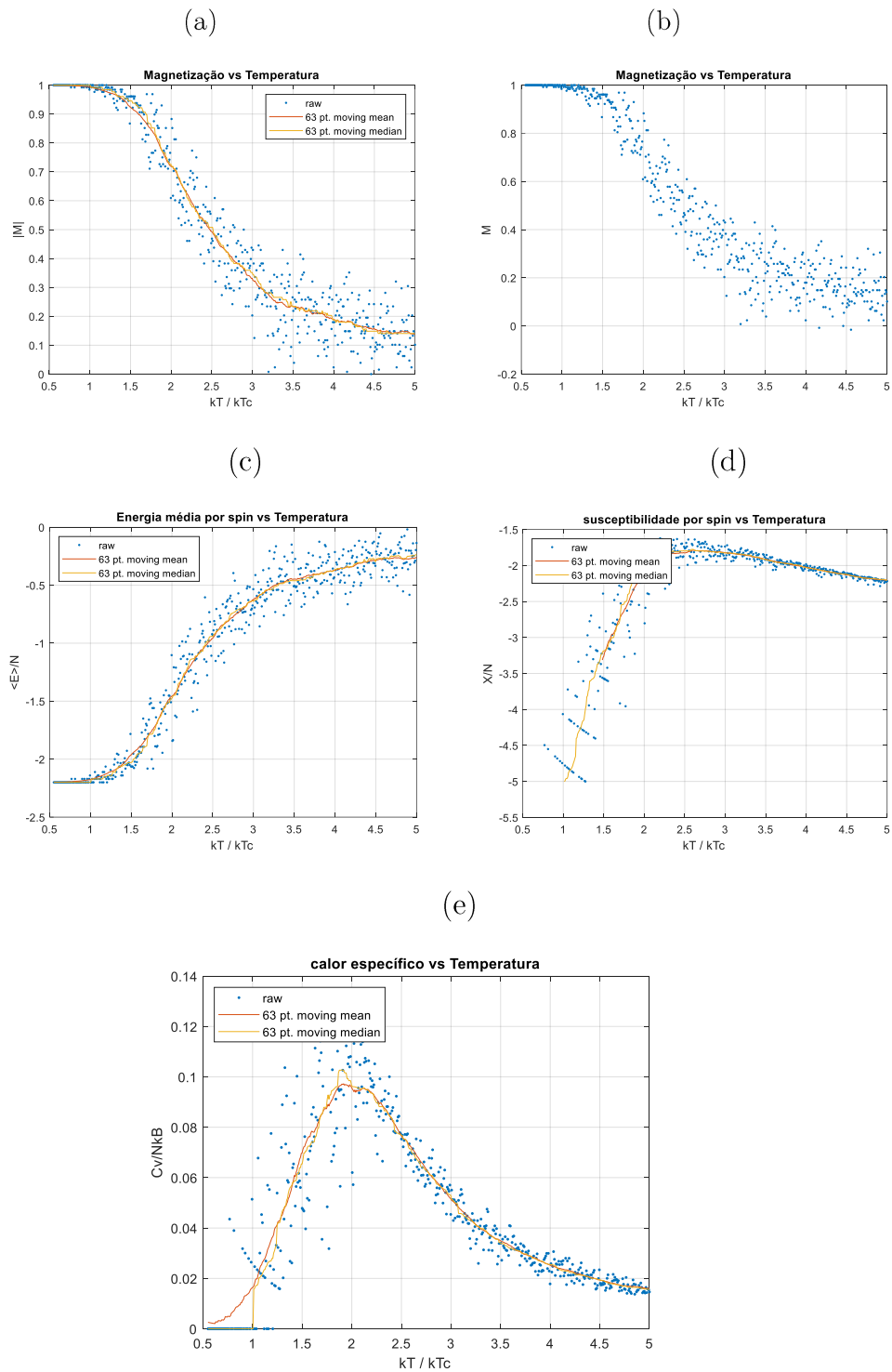


Fonte: Autor.



A susceptibilidade magnética, figuras 16(d) e 17(d), aumenta seu máximo de 1,5 para 2,5 acima da temperatura de Curie e seu decréscimo é mais lento com o aumento do campo aplicado de 0.6 até 0.8. Já o calor específico, Figuras 16(e) e 17(e), tem diminuído de 0,15 para 0,10 e um aumento de temperatura desse máximo de 1.0 para 2.5. Além disso existe uma influência do campo magnético em seu decréscimo, aumentando com o aumento do campo aplicado.

Figura 17: Simulação 4:  $H = 0.6$ ;  $J = 0.8$



Fonte: Autor.

## 5. CONCLUSÕES FINAIS

Neste trabalho estudamos a termodinâmica dos materiais ferromagnéticos do ponto de vista didático-pedagógico. Entendemos que fazer nosso trabalho em cima de métodos estatísticos, seria uma ótima opção pois são muito importantes para o tratamento de modelos matemáticos de sistemas físicos, dentre outros. Portanto, a simulação é um recurso valioso no meio acadêmico, fazendo parte do tripé que sustenta o entendimento que temos da natureza, juntamente com os experimentos e os recursos teóricos. Em nosso trabalho, contamos com simulações, com auxílio de ferramenta MATLAB, usamos o algoritmo de metropolis em Monte Carlo (MC) para rede quadrada de Ising, Fizemos varios testes para que pudéssemos chegar a um número melhor de passos de monte carlo, que nos desse resultados mais precisos e concluimos que, 512 passos era um ótimo numero, para comecemos nosso trabalho de pesquisa, A partir dai, rodamos o programa e extraímos os dados de algumas propriedades termodinâmicas ferromagnéticas, em temperaturas finitas.

Nosso intuito era comparar o comportamento termodinâmicos ferromagnéticos quando submetido na presença de um campo magnético  $H=0$  e quando o campo magnético for  $H=0.6$ , O programa nos permite extrair e analisar o calor específico, a susceptibilidade Magnética por spin, a magnetização e módulo da magnetização  $|M|$ , a energia media por spin, a rede analisada foi uma rede quadrada de  $16 \times 16$ , com temperatura variando 0.6 a 5.0 vezes a temperatura de Curie com o acoplamento de normalização  $J=0,6$  para o primeiro caso quando o campo magnético fosse  $H=0$  para um campo magnético externo  $H=0,6$  o acoplamento de normalização também  $J=0,6$ , podemos observar que o algoritmo realmente é extraordinario apesar de ser limitados para redes quadradas muitos maiores ele se motrou muito eficiente para redes menores como é o nosso caso, pois nos deu um resultado que já era esperado, para materiais ferromagnéticos, como analisamos as interações microscópicas de modo a descrever seu comportamento em função da temperatura.

Analisando os dois casos verificamos que há sim uma diferença nos comportamentos nas características termodinâmicas ferromagnéticas quando se está na presença ou não de um campo magnético externo e se aplica temperaturas diferentes da sua temperatura crítica, essas diferenças são fáceis de se observar quando olhamos os gráficos gerados nas nossas simulações. No qual foram discutidas no capítulo anterior. Assim, investigamos o comportamento das principais características de materiais ferromagnéticos, do ponto de vista da teoria clássica, mesmo que em determinados aspectos a Mecânica Quântica e física estatística, tenha que ser necessárias, por ser o tratamento mais adequado para esse tipo de investigação.

Os procedimentos abordados nesse trabalho nos permitem, descrever um texto visando esclarecer, de forma didática e simples, alguns dos principais aspectos referentes às características termodinâmicas dos materiais ferromagnéticos em diferentes situações, aqui no caso observamos esses materiais a temperaturas finitas na presença de um campo ou não, dessa forma, nosso intuito é contribuir um pouco, com os estudos que já se tem relacionado ao assunto e mostrar nossos resultado afim de esclarecer e tornar mais claro para os estudantes e leitores que sejam ou não da área, para que os mesmos tenham um melhor entendimento da termodinâmica de materiais Ferromagnéticos na presença de um campo magnético, nesse caso  $H=0$  e  $H=0,6$ .

Esse TCC deverá servir como trabalho texto básico para outros que tenha interesse pelas propriedades magnéticas.

## REFERÊNCIAS

- ARNDT, Daniela Vanessa. O Discurso De Alunos Do Ensino Médio Sobre O Ensino De Eletromagnetismo Por Investigação. 2018. Trabalho de Conclusão de Curso (TCC) apresentado ao curso de Licenciatura em Ciências Exatas, Setor Palotina, da Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à obtenção do título de Licenciatura em Ciências Exatas – Habilitação em Física.
- BRASIL. Orientações Educacionais Complementares aos Parâmetros Curriculares Nacionais (PCN+). Ciências da Natureza e Matemática e suas Tecnologias. Brasília: MEC, 2006.
- BRASILMAGNETS. História Do Magnetismo. 2021. Disponível em: <https://www.brasilmagnets.com.br/informe-se> Acesso em: 15 de maio de 2021.
- BRACHO R., Gustavo J. B. Rodríguez, O Porquê de Estudarmos os Materiais Magnéticos, Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 20, no. 4, pg. 315, Dezembro, 1998
- COORDENADORIA Integrada De Tecnologia da Informação e Comunicação- CTIC. Orientações gerais sobre instalação do software MATLAB. 2021. Disponível em: <https://www.citic.unicamp.br/matlab> Acesso em: 13 de maio de 2021.
- CALLISTER, W. D., Ciência e Engenharia de Materiais: Uma Introdução. John Wiley & Sons, Inc., 2002.
- CABRA, D. C., A. Honecker, and P. Pujol. Magnetization curves of antiferromagnetic heisenberg spin- $\frac{1}{2}$  ladders. Phys. Rev. Lett., 79(25):5126\_5129, Dec 1997.
- FARIA, Rubens N., Rubens N. Faria & Luis Felipe C. P. Lima, Introdução ao Magnetismo dos Materiais Magnéticos – São Paulo: Editora Livraria da Física, 2005.
- FEREGUETI, Larissa. MATLAB na Engenharia: conheça seus usos e aplicações. 2019. Disponível em: <https://engenharia360.com/matlab-na-engenharia-conheca-seus-usos-e-aplicacoes/> Acesso em: 15 de maio de 2021.
- FREITAS, Caio Augusto Fonseca De. Software baseado em MATLAB® para Cálculo e Análise Tridimensional de Campos Elétricos e Magnéticos em Linhas de Transmissão. 2017.
- GENNES, P. G. Solid State Communications. 1, 132, 1963.p. 132-137. ISING, E. Theorie des Ferromagnetismus; Z. Phys. 31 (1).1925. p. 253-258.

- G.RIZZI, Leandro G.Z., e Rafael B. Frigori, FRIGORI, Termodinâmica do modelo de Ising com interações de alcance infinito via ensemble canônico generalizado, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol.34, n.1, 1306 (2012),
- VLECK, Van J. H., A survey of the theory of ferromagnetism. *Rev. Mod. Phys.*, 18(20):4967, 2006.
- J.M.F. Bassalo. Nascimento da física. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol.18, n°2, pg. 95, junho, 1996.
- JU Lee *et al.* Ising-Type Magnetic Ordering in Atomically Thin FePS<sub>3</sub>. *Nano Letters* 10.1021/acs.nanolett.6b03052 (2016).
- MATLAB. Matemática. Gráficos. Programação. 2021. Disponível em: <https://www.mathworks.com/products/matlab.html> Acesso em: 15 de maio de 2021.
- RONALD, G. M., ARTHUR, R. D. (1961). Magnetic survey off the west coast of the United States.
- NAVIOSEPORTOS. AGULHA MAGNÉTICA DE GOVERNO. 2021. Disponível em: <https://navioseportos.com.br/br/index.php/uteis/museu-virtual/478-agulha-magnetica-de-governo> Acesso em: 12 de maio de 2021.
- NOLTING.W.; RAMAKANTH, A. Quantum theory of Magnetism. Springer - Verlag Berlin Heidelberg 2009.
- NOVAK, M.A. Introdução ao Magnetismo. IF - UFRJ - II Escola Brasileira de Magnetismo 1999.
- POMALIS, Mauren. CAMPO MAGNÉTICO. 2017. Disponível em: <https://docplayer.com.br/125434999-Fisica-iii-professora-mauren-pomalis-engenharia-eletrica-3o-periodo-unir-porto-velho-2017-1.html> Acesso em: 10 de maio de 2021.
- PORTAL GSTI. O que é MatLab? 2019. Disponível em: <https://www.portalgsti.com.br/matlab/sobre/> Acesso em: 14 de maio de 2021.
- PRODUTOS MAGNÉTICOS. Os benefícios do magnetismo para a saúde. 2021. Disponível em: <https://teslaimas.com.br/os-beneficios-do-magnetismo-para-a-saude-2/> Acesso em: 15 de maio de 2021.
- P. Hypothese du champ Moleculaire et de la Propriete Ferromagnetique. *J. de Phys.- 6*. 1907.p. 661 - 690.
- PhD thesis, Università degli studi di Napoli Federico II, 2004.
- Physica A*, 357:173\_180, 2005.
- R.R. Montenegro and M.D. Coutinho-Filho. Quasi-one-dimensional quantum ferrimagnets. solvable ising-heisenberg diamond chains. *Journal of Physics: Condensed Matter*,
- STRECKA, J.; JASCUR, M. A brief account of the ising and ising-like models mean-field, effective-field and exact results. Institute of Physics, SAS, Bratislava,

Slovakia, nov., 2015, p.1-133. WEISS,

TEIXEIRA, Mariane Mendes. Magnetismo. 2019. Disponível em: <https://mundoeducacao.uol.com.br/fisica/magnetismo.htm> Acesso em: 13 de maio de 2021.

TONIDANDEL, D. A. V.; ARAÚJO, A. E. A. A.; BOAVENTURA, W. C. História da eletricidade e do magnetismo: da Antiguidade à Idade Média. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 40, nº 4, 2018.

TONIDANDEL, Danny Augusto Vieira; ARAUJO, Antônio Emílio Angueth de and BOAVENTURA, Wallace do Couto. História da Eletricidade e do Magnetismo: da Antiguidade à Idade Média. *Rev. Bras. Ensino Fís.* [online]. 2018, vol.40, n.4, e4602. Epub. Aug. 02, 2018. ISSN 1806-9126. <https://doi.org/10.1590/1806-9126-rbef-2018-0046>.

ZEMANSKY, M. W. Zemansky, Calor e Termodinâmica, 5a ed. Editora Guanabara dois, 1978.

## APÊNDICE A

### Termo de Autorização de Publicação de Produção Acadêmica

O estudante JOSIEL DO AMPARO SOUSA do curso de Licenciatura em Física, matrícula **20171001800080**, telefone: (62) **982389968** e-mail **josieljosielvictor@gmail.com**, na qualidade de titular dos direitos autorais, em concordância com a Lei nº 9.610/98 (Decreto dos Direitos do Autor), autoriza a Pontifícia Universidade Católica de Goiás (PUC Goiás) a disponibilizar o trabalho de Conclusão de Curso intitulado **A TERMODINÂMICA DE MATERIAIS FERROMAGNÉTICOS**, gratuitamente, sem ressarcimento dos direitos autorais, por 5 (cinco) anos, conforme permissões do documento, em meio eletrônico, na rede mundial de computadores, no formato especificado (Texto (PDF), imagem (GIF ou JPEG); Som (WAVE, MPEG, AIFF, SND); vídeo (MPEG, MWV, AVI, QT); outros, específicos da área; para fins de leitura e/ou impressão na internet, a título de divulgação da produção científica gerada nos cursos de graduação da PUC Goiás.

Goiânia, 15 de junho de 2021.

Assinatura do autor: 

Nome Completo do Autor: JOSIEL DO AMPARO SOUSA.

Assinatura do Professor-orientador: 

Nome completo do professor-orientador: ANDRÉ LUIZ CARDOSO DA SILVA