

Seção

Resumo em Proceedings

## Teoria da magnetoeletricidade aplicada aos multiferróicos

*C.J. Calderon Filho*

*G.E. Barberis*

DOI: <https://doi.org/10.5196/physicae.proceedings.XEJP.16>

### Resumo

Multiferróicos são compostos que apresentam (anti)ferromagnetismo junto com ferroeletricidade. Algumas vezes, ferroelasticidade é também encontrada nesses compostos, mas as transições não são necessariamente correlacionadas. Quando a correlação existe, como no caso da família  $\text{LiXPO}_4$  ( $X = \text{Mn, Fe, Co, Ni}$ ), as transições magnética e elétrica ocorrem simultaneamente e, neste caso, o efeito magnetoelétrico pode ser induzido por campo. O fenômeno da magnetoeletricidade foi proposto primeiramente por Landau e Lifshitz como um efeito que poderia existir em alguns cristais magnéticos, e verificado experimentalmente por Astrov em 1960. Mesmo depois de 50 anos da descoberta deste importante fenômeno, existem poucos artigos tratando da explicação física do surgimento deste em alguns compostos magnéticos. Aqui, apresentamos cálculos numéricos muito simples para simular este acoplamento das duas transições. Nós assumimos uma subrede magnética formada por dipolos magnéticos clássicos, acoplados a uma outra subrede não magnética que consiste em dipolos elétricos clássicos. Este acoplamento é realizado utilizando o fenomenológico hamiltoniano de spin-rede, onde os momentos magnéticos de cada posição da rede estão acoplados a deformações. A simulação foi resolvida via Método de Monte Carlo. Na versão mais simples, a subrede magnética é um sistema de Ising 2D ferromagnético, somente com interações de primeiros vizinhos, e os dipolos elétricos são permanentes. Com essa aproximação, a transição magnética de segunda ordem induz ferroeletricidade nos dipolos elétricos. A minimização de energia do hamiltoniano nos dá uma interdependência entre a temperatura de transição e os parâmetros magnéticos, elétricos e magnetoelétricos.