9. Magnetismo

→ Sistemas clássicos não apresentam momento magnético, mesmo na presença de campos magnéticos externos.

→ Fenômeno intrinsicamente quântico.

1. Hamiltoniana atômica em um campo magnético

Na ausência de campo:

$$\mathcal{H}_0 = T_0 + V, \qquad \boxed{T_0 = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m}} \quad \text{(en. cinética)}$$

Na presença de campo (substituição canônica):

$$\boxed{\vec{p}_i \to \vec{p}_i + e\vec{A}_i} \quad \text{onde } \vec{A}_i = \vec{A}(\vec{r}_i) = \text{pot. vetor} \quad (\vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A})$$

Para $\vec{B} = B\hat{z} = cte$ no calibre de Coulomb ($\vec{\nabla}\cdot\vec{A} = 0$):

$$\boxed{\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{r}\times\vec{B} = \frac{1}{2}(x\hat{y} - y\hat{x})B}$$

Com isso:

$$T = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{(\vec{p}_i + e\vec{A}_i)^2}{2m} = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{N_e}\left[p_i^2 + e(\vec{p}_i\cdot\vec{A}_i + \vec{A}_i\cdot\vec{p}_i) + e^2A_i^2\right]$$

Agora, como $\vec{p}_i \to -i\hbar\vec{\nabla}_i$:

$$(\vec{p}_i\cdot\vec{A}_i)\psi = -i\hbar(\vec{\nabla}_i\cdot\vec{A}_i)\psi - i\hbar(\vec{A}_i\cdot\vec{\nabla}_i)\psi = (\vec{A}_i\cdot\vec{p}_i)\psi$$

$(\vec{\nabla}_i\cdot\vec{A}_i) = 0$ no calibre de Coulomb!

Obtemos:

$$T = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{N_e}\left[p_i^2 + 2e(\vec{A}_i\cdot\vec{p}_i) + e^2A_i^2\right]$$

Substituindo a expressão de $\vec{A}_i$:

- $\vec{A}_i \cdot \vec{p}_i = \frac{B}{2}(x_i p_{yi} - y p_{xi}) = B L_{zi}$

↳ Componente z do momento angular.

- $A_i^2 = \frac{B^2}{4}(x_i^2 + y_i^2)$

logo:

$$\Delta T = T - T_0 = \frac{e}{2m}\underbrace{\left(\sum_{i=1}^{N_e} L_{zi}\right)}_{= L_z \text{ (mom. angular total)}} \cdot B + \frac{1}{2m}\frac{e^2B^2}{4}\sum_{i=1}^{N_e}(x_i^2 + y_i^2)$$

$$= \mu_B \vec{L}\cdot\vec{B} + \frac{e^2B^2}{8m}\sum_{i=1}^{N_e}(x_i^2 + y_i^2)$$

onde

$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 0.579 \times 10^{-8}$ eV/G (magneton de Bohr) e

$\vec{L} = \vec{\ell}/\hbar$.

Além dessas contribuições, devemos levar em conta tbm a interação d os spins (acoplamento Zeeman):

$$\Delta \mathcal{H}_{spin} = g_0 \mu_B \vec{S}\cdot\vec{B}$$

onde $\vec{S} = \vec{s}/\hbar$ (spin total) e $g_0 \simeq 2{,}0023$ (fator g do e^-)

Portanto:

$$\Delta \mathcal{H} = \Delta T + \Delta \mathcal{H}_{spin} = \mu_B(\vec{L} + g_0\vec{S})\cdot\vec{B} + \frac{e^2B^2}{8m}\sum_{i=1}^{N_e}(x_i^2 + y_i^2)$$

Paramagnetismo (em geral) — Diamagnetismo

2. Diamagnetismo de Larmor - Langevin

↳ Termo linear em B é dominante, exceto em sistemas de camada fechada, onde $L^2|0\rangle = S^2|0\rangle = 0$

↳ Nesses casos, olhamos p/ o termo quadrático:

$$\Delta \mathcal{H}_{dia} = \frac{e^2 B^2}{8m} \sum_{i=1}^{Ne} (x_i^2 + y_i^2)$$

Como não há mom. angular orbital ou de spin, o estado fundamental é não-degenerado. Assim, tratando o termo acima como uma perturbação, obtemos, em 1ª ordem:

$$\Delta E_0 = \langle 0 | \Delta \mathcal{H}_{dia} | 0 \rangle = \frac{e^2 B^2}{8m} \sum_{i=1}^{Ne} \langle 0 | (x_i^2 + y_i^2) | 0 \rangle$$

onde $|0\rangle$ representa o estado fundamental.

Note agora que $r_i^2 = x_i^2 + y_i^2 + z_i^2$ e, p/ simetria esférica (válida p/ camada fechada!):

$$\langle x_i^2 \rangle = \langle y_i^2 \rangle = \langle z_i^2 \rangle = \frac{\langle r_i^2 \rangle}{3}$$

Portanto:

$$\Delta E_0 = \frac{e^2 B^2}{8m} \sum_{i=1}^{Ne} \frac{2}{3} \langle r_i^2 \rangle \equiv \boxed{\frac{e^2 B^2}{12m} Ne\, \rho_0^2}$$

onde

$$\rho_0^2 = \frac{1}{Ne} \sum_{i=1}^{Ne} \langle r_i^2 \rangle \quad \text{(raio quadrático médio do átomo).}$$

Para $T = 0$, podemos calcular a magnetização de um sólido como:

$$\boxed{M = -\frac{1}{V} \frac{\partial E}{\partial B}} \quad \text{(mom. de dípolo magnético / un. volume)}$$

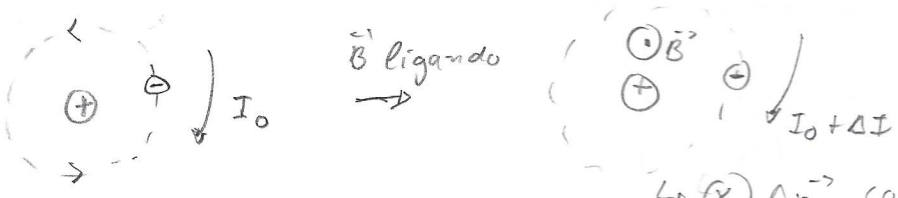
onde E = energia total do sólido.

Pensando em um sólido formado por N átomos idênticos de camada fechada, encontramos:

$$\Delta E = N \Delta E_0 \rightarrow \boxed{M = -\frac{N}{V}\frac{\partial(\Delta E_0)}{\partial B} = -\frac{n e^2 N e \rho_0^2 B}{6m}}$$

↳ O sinal negativo mostra que $\vec{M}$ tem sentido contrário a $\vec{B}$, o que é característico do diamagnetismo.

↳ Resultado análogo a lei de Lenz do eletromagnetismo clássico:



↳ (x) $\Delta\vec{m}$ contrário a $\vec{B}$!

Susceptibilidade magnética

Por definição:

$$\boxed{\chi_m = \mu_0 \frac{\partial M}{\partial B}}$$ (p/ um meio linear, χ_m independe de B)

Para o sólido acima:

$$\boxed{\chi_m = -\frac{\mu_0 n e^2 N e \rho_0^2}{6m}}$$

↳ $\chi_m < 0$ e cte é característico do diamagnetismo.

↳ Bom modelo p/ cristais de gases nobres e íons de camada fechada.

↳ Diamagnetos são repelidos por ímãs. Imo tbm ocorre p/ supercondutores, que são diamagnetos perfeitos! (levitação magnética)

3. Regras de Hund

↬ p/ sistemas de camada aberta, o termo linear domina.

↬ devemos saber como obter os números quânticos apropriados nessa situação.

↬ Interação elétron-elétron + acoplamento spin-órbita ⇒ regras de Hund

3.1. Acoplamento de Russel-Saunders

↬ Acoplamento SO ∝ $\vec{L}\cdot\vec{S}$ ∝ $J^2 - L^2 - S^2$ ⇒ estados quânticos definidos por $|J\,L\,S\,J_z\rangle$.

↬ L_z e S_z tbm são utilizados e estão relacionados por $J_z = L_z + S_z$.

Operador	Autovalores	
L^2	$L(L+1)$	
L_z	L_z	
S^2	$S(S+1)$	$(\vec{J} = \vec{L} + \vec{S})$
S_z	S_z	
J^2	$J(J+1)$	
J_z	J_z	

3.2. Primeira regra

↬ S deve ser máximo, em acordo c/ o princípio da exclusão de Pauli

3.3. Segunda regra

↬ L deve ser máximo, respeitando a regra anterior.

3.4. Terceira regra

↝ Seja n o nº total de elétrons na camada atômica.

↝ Devemos ter:

$$J = \begin{cases} |L-S|, & \text{se } n \leq 2\ell+1 \\ L+S, & \text{se } n > 2\ell+1 \end{cases}$$

Exemplos:

a) Cu^{2+} → última camada $3d^9$



$m_\ell =$ +2 +1 0 −1 −2

↝
- S máximo = 2
- L máximo = 2
- $J = L - S = 0$

b) Er^{3+} → última camada $4f^{11}$



$m_\ell =$ +3 +2 +1 0 −1 −2 −3

↝
- $S = 3/2$
- $L = 6$
- $J = L + S = 15/2$

4. Paramagnetismo em isolantes

↝ Vamos supor que o sólido é formado por íons idênticos e não-interagentes c/ mom. angular total $J \neq 0$.

↝ Como $J \neq 0$, o estado fundamental na ausência de campo tem degenerescência $2J+1$ na ausência de campo.

↝ Da teoria de perturbação degenerada, devemos diagonalizar:

$$\langle J L S J_z | \Delta\mathcal{H}_{para} | J L S J_z' \rangle = \mu_B B \langle J L S J_z | L_z + g_0 S_z | J L S J_z' \rangle$$

↝ Como $\Delta\mathcal{H}_{para} = \mu_B (L_z + g_0 S_z) B$, estados com J ou L ou S diferentes não são conectados!

Do teorema de Wigner-Eckart (Cohen - p. 1055), podemos escrever:

$$\boxed{\langle J L S J_z | L_z + g_0 S_z | J L S J_z' \rangle = g(J,L,S)\, J_z\, \delta_{J_z, J_z'}}$$

onde, p/ $g_0 \simeq 2$:

$$\boxed{g(J,L,S) = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}}$$ (fator g de Landé)

Como $J_z = -J, -J+1, \ldots, J-1, J$, os níveis se desdobram em $2J+1$ níveis igualmente espaçados por $g\mu_B B$:

$$\boxed{\Delta E(J_z) = g\mu_B B J_z}$$



Magnetização

Levando em conta as ocupações de cada nível, calculamos a função de partição p/ um átomo como:

$$Z_1 = \sum_{J_z=-J}^{+J} e^{-\beta \Delta E(J_z)} = \sum_{-J}^{J} e^{-\beta g \mu_B B J_z}$$ ↳ progressão geométrica!

($2J+1$ termos)

$$= e^{+\beta g \mu_B B J} \cdot \left[\frac{e^{-\beta g \mu_B B (2J+1)} - 1}{e^{-\beta g \mu_B B} - 1} \right]$$ ($\times \frac{e^{\beta g \mu_B B/2}}{e^{\beta g \mu_B B/2}}$)

(a_1)

$$= \frac{e^{\beta g \mu_B B (J+1/2)} - e^{-\beta g \mu_B B (J+1/2)}}{e^{\beta g \mu_B B/2} - e^{-\beta g \mu_B B/2}}$$

$$= \boxed{\frac{\operatorname{senh}\left[\beta g \mu_B B (J+1/2)\right]}{\operatorname{senh}\left(\beta g \mu_B B/2\right)}}$$ ($\beta \equiv 1/k_B T$)

Para N átomos isolados, a função de partição correspondente é:

$$Z = Z_1^N$$

e a energia livre é:

$$e^{-\beta F} = Z \quad \Rightarrow \quad F = -N k_B T \ln Z_1$$

Para $T \neq 0$, calculamos a magnetização como:

$$M = -\frac{1}{V}\frac{\partial F}{\partial B} = \frac{N}{V}\frac{k_B T}{Z_1}\frac{\partial Z_1}{\partial B}$$

$$= \frac{N}{V}\frac{k_B T}{Z_1}\left\{\beta g \mu_B (J+1/2)\cosh\left[\beta g \mu_B B (J+1/2)\right]\right.$$

$$\cdot \operatorname{senh}(\beta g \mu_B B/2) - \beta g \mu_B/2 \operatorname{senh}\left[\beta g \mu_B B (J+1/2)\right]$$

$$\left.\cdot \cosh(\beta g \mu_B B/2)\right\} \cdot \frac{1}{\operatorname{senh}^2(\beta g \mu_B B/2)}$$

$$= \frac{N}{V} g \mu_B \left\{ (J+1/2) \operatorname{cotgh}\left[\beta g \mu_B B (J+1/2)\right] - \frac{1}{2}\operatorname{cotgh}(\beta g \mu_B B/2)\right\}$$

Definindo a <u>função de Brillouin</u>:

$$\boxed{B_J(x) = \frac{2J+1}{2J}\operatorname{cotgh}\left(\frac{2J+1}{2J}x\right) - \frac{1}{2J}\operatorname{cotgh}\left(\frac{x}{2J}\right)}$$

temos:

$$\boxed{M = \frac{N}{V} g \mu_B J B_J(\beta g \mu_B B J)}$$

Casos limite

(a) Baixas temperaturas ou altos campos ($x \gg 1$):

$\text{cotgh}(x) \longrightarrow 1 \Rightarrow B_J(x) \to 1$ p/ $x \to \infty$

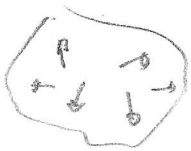
Com isso:

$$\boxed{M \to \frac{N}{V} g \mu_B J}$$ não independe de T

↝ Magnetização satura em valor máximo, correspondente a todos os dipolos $\overset{\text{atômicos}}{m} = g\mu_B J$ alinhados no sentido de $\vec{B}$.

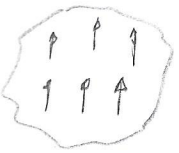
↝ Para temperaturas intermediárias, desordem compete c/ o ordenamento (ou p/ baixos campos).

↝ Comportamento característico do paramagnetismo



T alto ou
B baixo

$\Rightarrow$



T baixo ou
B alto

$\uparrow \vec{B}$

(b) Altas temperaturas ou baixos campos ($x \ll 1$):

$$\text{cotgh}(x) \cong \frac{1}{x} + \frac{x}{3} \Rightarrow B_J(x) \cong \frac{J+1}{J} \cdot \frac{x}{3}$$

Com isso:

$$M = \frac{N}{V} g \mu_B J \cdot \frac{(J+1)}{J} \cdot \frac{\beta g \mu_B B J}{3}$$

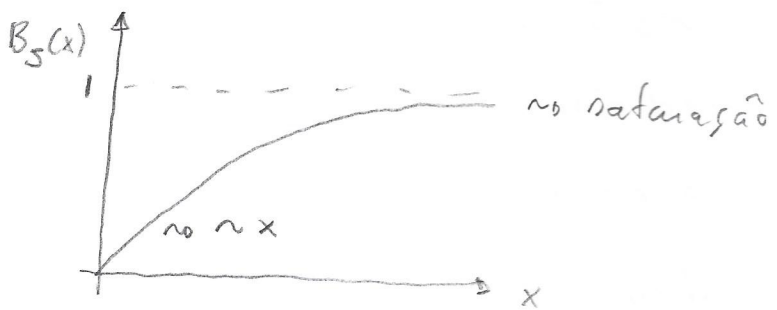
$$= \boxed{\frac{N}{V} (g\mu_B)^2 \frac{J(J+1)}{3 k_B T} \cdot B}$$

Note que $M > 0$, como esperado no paramagnetismo, e depende de B. A susceptibilidade correspondente é:

$$\chi_m = \mu_0 \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{N}{V} \mu_0 (g\mu_B)^2 \frac{J(J+1)}{3k_B T}$$

Note que $\chi_m > 0$ e $\chi_m \sim 1/T$. Este resultado é conhecido como Lei de Curie.

(c) Caso geral:



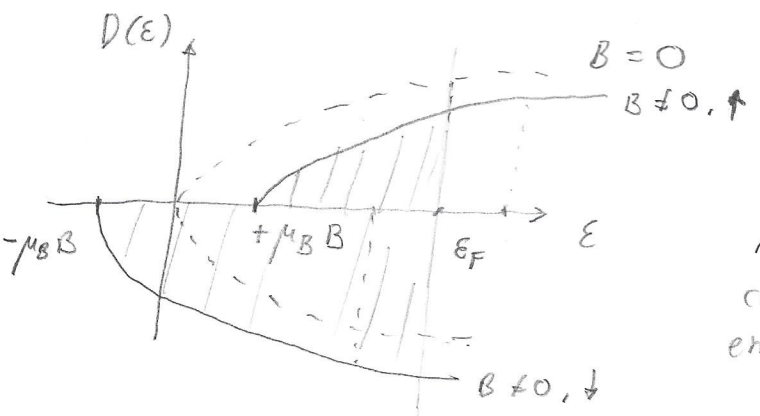
$\Rightarrow$ M tem comportamento análogo como função de

$$x = \frac{g\mu_B B J}{k_B T}$$

---

5. Paramagnetismo de Pauli em metais

- Não podemos pensar em metais como uma coleção de átomos fracamente interagentes.
- $\Rightarrow$ O gás de eletrons livres é um ponto de partida + conveniente.
- Como a energia de um eletron num campo magnetico varia de $\Delta E = -\vec{m} \cdot \vec{B} = g_0 \mu_B \vec{S} \cdot \vec{B}$, teremos p/ a densidade de estados:



($g_0 \simeq 2$)

- Estados de spins contrários se deslocam em sentidos opostos.

↳ Para $B = 0$, teremos um número igual de elétrons c/ spins contrários: $N_\uparrow = N_\downarrow = N/2$.

↳ Para $B \neq 0$, teremos $N_\downarrow > N_\uparrow$ p/ minimizar a energia total do sistema ⇒ magnetização!

Assumindo que $\Delta N = N_\downarrow - N_\uparrow \ll N$, podemos escrever:

$$M = \mu_B \frac{\Delta N}{V} \simeq \mu_B \cdot \frac{D(E_F)}{2} \cdot (2\mu_B B) = \boxed{\mu_B^2 D(E_F) \cdot B}$$

onde $D(E_F)$ é a dens. de estados do sistema não-magnético (a $B=0$), que é o dobro da dens. p/ uma única componente de spin.

Susceptibilidade:

$$\chi_m^P = \frac{\partial M}{\partial B} \mu_0 = \boxed{\mu_0 \mu_B^2 D(E_F)}$$

↳ Note que $\chi_m = cte > 0$, como característico do paramagnetismo. (de Pauli)

↳ O modelo acima assume que $D(E)$ não muda na presença de B, o que não é verdade. Ao levar em conta este efeito (orbital), chega-se a uma contribuição diamagnética:

$$\boxed{\chi_m^L = -\frac{1}{3} \chi_m^P}$$

Portanto, $\chi_m = \chi_m^P + \chi_m^L = \frac{2}{3} \chi_m^P = \frac{2}{3} \mu_0 \mu_B^2 D(E_F)$.

6. Origens da interação magnética

Até aqui, tratamos os momentos magnéticos como independentes. Como eles interagem?

(i) Interação dipolar

Do eletromagnetismo clássico, sabemos que a interação entre dois momentos magnéticos $\vec{m}_1$ e $\vec{m}_2$ separados por uma distância r é:



$$U \sim \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \vec{m}_1 \cdot \vec{m}_2$$

Para $m_1 = m_2 \simeq \mu_B$ e $r \simeq 1\,\text{Å}$, encontramos:

$$U \sim \frac{4\pi \times 10^{-7}}{4\pi \times 10^{-30}} \cdot (9{,}27 \times 10^{-24})^2 \,\text{J} = 8{,}59 \times 10^{-24}\,\text{J}$$

$$\sim 5{,}34 \times 10^{-5}\,\text{eV} \sim \boxed{10^{-4}\,\text{eV}}$$

Como $U \ll k_B T$ a temp. ambiente, a interação dipolar sozinha **não** é capaz de produzir ordenamento magnético!

(ii) Interação de troca (exchange)

↳ Resulta da interação coulombiana + princ. da exclusão de Pauli.

↳ Ao somarmos os momentos angulares $s = 1/2$ de dois elétrons, temos o spin total $S = 0$ ou $S = 1$. Podemos formar os autoestados de S como:

$$S = 0 \Rightarrow |\chi_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right) \quad \text{(singleto)}$$

$$S = 1 \Rightarrow \begin{cases} |\chi_{11}\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\chi_{10}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right) \\ |\chi_{1-1}\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \quad \text{(tripleto)}$$

↳ Note que o estado singleto é anti-simétrico c/ respeito à permutação de elétrons, enquanto os tripletos são simétricos

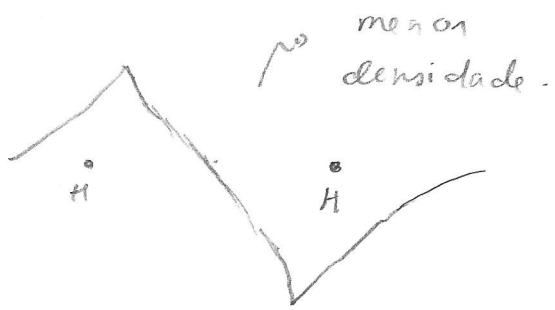
↳ Pelo princípio da exclusão de Pauli, a função de onda total p/ o sistema de 2 elétrons deve ser anti-simétrica c/ relação à permutação.

↳ Portanto, a parte orbital do estado singleto deve ser simétrica, enquanto a do tripleto deve ser anti-simétrica!

↳ Ilustração da parte orbital em uma molécula de H_2:



singleto



tripleto

Como consequência das diferentes intensidades da interação coulombiana nesses dois estados, as energias E_s e E_t são diferentes.

$\Rightarrow |E_s - E_t| \sim 0{,}1 - 1{,}0$ eV (energia de troca)

↳ produzem ordenamento magnético!

(iii) Hamiltoniana de Heisenberg

Ainda que $\hat{H}_0$ não dependa explicitamente de spins, podemos escrever uma hamiltoniana efetiva que incorpora os resultados acima.

Sejam $\vec{s}_1$ e $\vec{s}_2$ os spins de cada elétron e $\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$ o spin total.

Os autovalores devem satisfazer:

$$s_1^2 = s_2^2 \rightarrow s_1(s_1+1) = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) = \frac{3}{4}$$

Além disso:

$$S^2 = (\vec{s}_1 + \vec{s}_2)^2 = s_1^2 + s_2^2 + 2\,\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 \rightarrow \frac{3}{2} + 2\,\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2$$

Identificando os autovalores dos estados singleto e tripleto:

$$S = 0 \rightarrow S^2 \rightarrow 0$$

$$S = 1 \rightarrow S^2 \rightarrow S(S+1) = 2$$

encontramos:

$$\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 = \frac{1}{2}\left(S^2 - \frac{3}{2}\right) \rightarrow \begin{cases} -3/4, & \text{singleto} \\ +1/4, & \text{tripleto} \end{cases}$$

Desejamos que:

$$\mathcal{H}_{spin}\,|\chi_{00}\rangle = E_S\,|\chi_{00}\rangle \quad \text{e}$$

$$\mathcal{H}_{spin}\,|\chi_{1\,s_z}\rangle = E_t\,|\chi_{1\,s_z}\rangle \qquad (s_z = -1, 0, +1)$$

Assumindo que:

$$\boxed{\mathcal{H}_{spin} = E_0 - J\,\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2}$$

teremos:

$$E_0 + J \cdot 3/4 = E_S, \qquad E_0 - J \cdot 1/4 = E_t$$

e:

$$\boxed{J = E_S - E_t}, \qquad \boxed{E_0 = (E_S + 3E_t)/4}$$

J é a constante de troca

Podemos ainda fazer uma nova escolha de zero de energia e escrever:

$$\boxed{\mathcal{H}_{spin} = -J\, \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2}$$

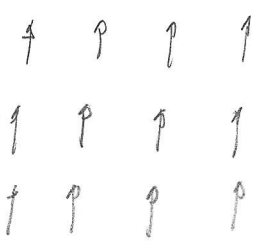
Note que:

- $J > 0$ favorece o alinhamento de spins
- $J < 0$ " " anti-alinhamento de spins.

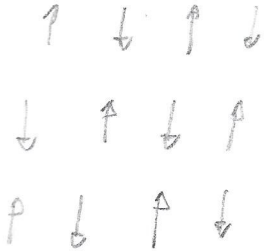
Para um conjunto de N spins $\{\vec{s}_i\}$ em uma rede, generalizamos o resultado acima p/ obter a <u>Hamiltoniana de Heisenberg</u>:

$$\boxed{\mathcal{H} = -\sum_{ij} J_{ij}\, \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j}$$

O ordenamento magnético resultante é definido pelo sinal de J_{ij} e sua variação c/ a distância entre $\vec{s}_i$ e $\vec{s}_j$!



Ferromagnetismo



Antiferromagnetismo

7. Teoria de campo médio p/ o ferromagnetismo

↝ Ordenamento paralelo de spins mesmo a $B = 0$ ($J > 0$).

↝ Efeito compete c/ a temperatura, que tende a desalinhar os spins.

↝ Na teoria p/ isolantes, encontramos:

$$M = \frac{N}{V}\, g\, \mu_B\, J\, B_J \quad (\beta g \mu_B B J)$$

Para um sistema de spins 1/2, onde $L=0$ e $J=S=1/2$, temos:

$$g = 2 \quad , \quad B_{1/2}(x) = 2\coth(2x) - \coth(x)$$

$$= \tanh(x)$$

Assim, escrevendo a magnetização por ion ($\times V/N$):

$$M = \mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)$$

Em um ferromagneto, devemos ter $M \neq 0$ mesmo a $B=0$. É razoável supor então que a interação de troca pode ser modelada por um campo interno B_{int}.

A nível de campo médio, supomos que:

$$B \to B + B_{int} = B + \lambda M$$

↳ campo interno é proporcional à própria magnetização!

A descrição aproximada da interação entre um spin e seus vizinhos, representada por n.

Com isto:

$$\boxed{M = \mu_B \tanh\left[\frac{\mu_B (B + \lambda M)}{k_B T}\right]}$$

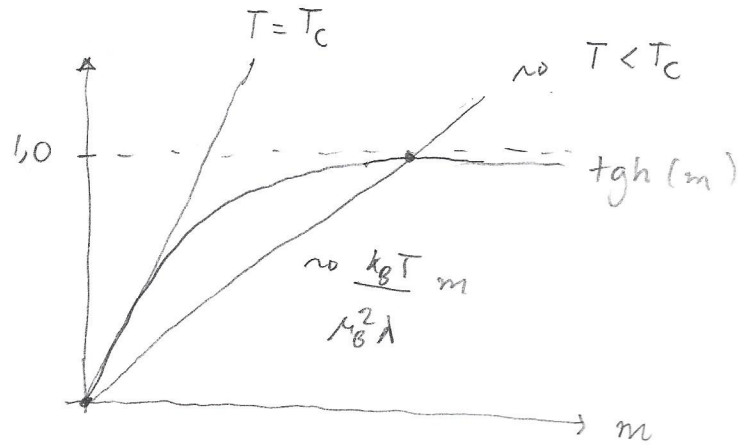
Esta equação transcendental determina M como função de B e T. Definindo:

$$m \equiv \frac{\mu_B (B + \lambda M)}{k_B T} \iff M = \frac{k_B T}{\mu_B \lambda} m - \frac{B}{\lambda}$$

Podemos reescrever:

$$\boxed{\frac{k_B T}{\mu_B^2 \lambda} m - \frac{B}{\mu_B \lambda} = \tanh(m)}$$

Esta equação pode ser resolvida graficamente. Para $\underline{B=0}$, temos:

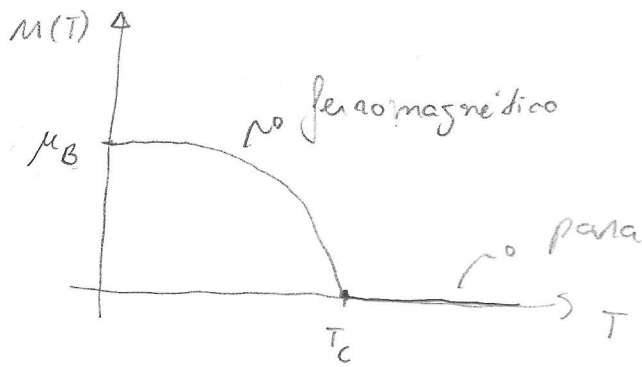


O pto de cruzamento entre a reta e a função tgh(m) define a solução. Note que só há solução com $\underline{m \neq 0}$ p/ $T < T_c$, onde:

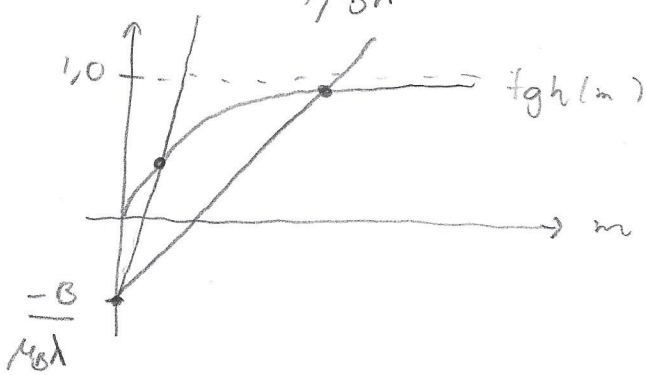
$$\frac{d}{dm}\left(\frac{k_B T_c}{\mu_B^2 \lambda} m\right) = \frac{d}{dm} tgh(m)\Big|_{m=0} = sech^2(m)\Big|_{m=0} = 1$$

$$\Rightarrow \boxed{T_c = \frac{\mu_B^2 \lambda}{k_B}}$$ ⇒ temperatura crítica (temp. de Curie!)

Para $T > T_c$, teremos apenas $m = 0$ como solução. Graficamente:



Para $B \neq 0$, a reta na solução gráfica deve ser deslocada p/ baixo por $B/\mu_B\lambda$:



⇒ Há sempre uma solução c/ $m \neq 0$ p/ qq T, incluindo $T > T_c$!

8. Mágnons

Como a teoria de campo médio se compara c/ o experimento? Um parâmetro relevante é o desvio de M c/ relação à saturação:

$$\frac{\Delta M}{M(0)} = \frac{M(0) - M(T)}{M(0)}$$

Na teoria de campo médio, p/ $\underline{k_B T \ll \mu_B \lambda M}$ e $\underline{B = 0}$:

$$\tanh(x) \simeq 1 - 2e^{-2x} \Rightarrow M(T) \simeq \mu_B - 2e^{-2\mu_B \lambda M(T)/k_B T}$$

Aproximando $M(T) \simeq M(0) = \mu_B$ na exponencial:

$$\frac{M(0) - M(T)}{M(0)} = 2e^{-2\mu_B^2 \lambda / k_B T} = \boxed{2e^{-2T_c/T}}$$

Portanto, a teoria prevê um desvio exponencial, o que sugere a presença de um gap de energia $\Delta E = 2k_B T_c$ no espectro de excitações.

Pensando no estado fundamental como todos os N spins paralelos, podemos pensar na excitação mais simples como um único spin invertido:

↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ⇒ ↑ ↑ (↓) ↑ ↑ ↑ ↑ ↑

Est. fundamental — Est. excitado

A variação de energia entre esses dois estados corresponde à variação de energia do spin invertido:

$$\Delta E = +\mu_B \underbrace{(\lambda/\mu_B)}_{= \lambda M(0)} - [-\mu_B(\lambda/\mu_B)] = \boxed{2\mu_B^2 \lambda = 2k_B T_c}$$

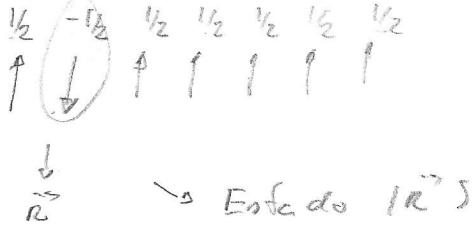
o que concorda c/ o resultado de campo médio.

No entanto, não é isto que se observa experimentalmente! Verifica-se que $\underline{\Delta M/M(0) \sim T^{3/2}}$.

Essa discussão sugere que deve haver excitações de energia mais baixa do que a que consideramos acima. De fato, elas correspondem aos <u>mágnons</u>, que são ondas de spin.

Um mágnon é formado por uma combinação linear de estados d um spin invertido em diferentes sítios:

$$|\vec{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} |\vec{R}\rangle$$



onde a soma é feita sobre os sítios $\vec{R}$ de uma rede monoatômica. Note que $|\vec{k}\rangle$ é basicamente uma soma de Bloch, como já vimos em capítulos anteriores!

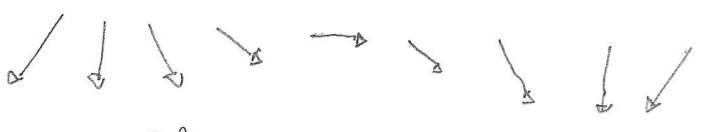
Pode-se mostrar (ver apostila) que, de fato, o estado $|\vec{k}\rangle$ tem uma energia de excitação mais baixa, dada por:

$$\Delta E(\vec{k}) = \sum_{\vec{R}} J(\vec{R}) \operatorname{sen}^2\left(\frac{\vec{k}\cdot\vec{R}}{2}\right)$$

↳ acoplamento entre um átomo na origem e outro no sítio $\vec{R}$.

e que este resultado dá o comportamento correto medido experimentalmente.

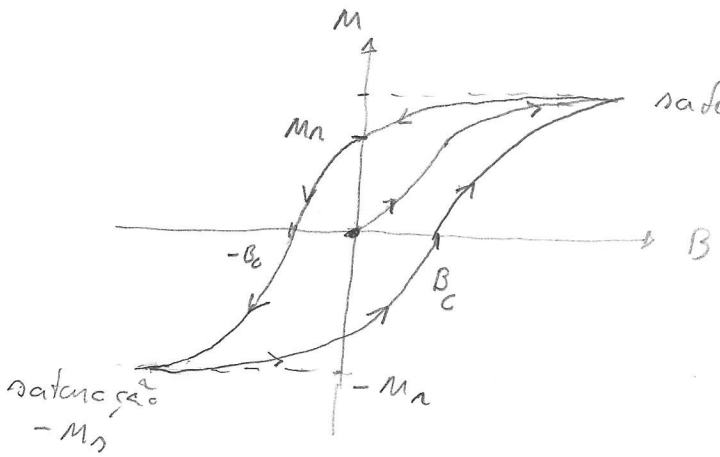
<u>Obs</u>: Note que o fator $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}$ dá diferentes fases a diferentes excitações de sítios da rede. Isto se traduz numa precessão de spins ao longo da rede, ou seja, diferentes valores de S_x e S_y. Daí o comportamento de onda de spin:



Diferentes sítios

9. Histerese e domínios magnéticos

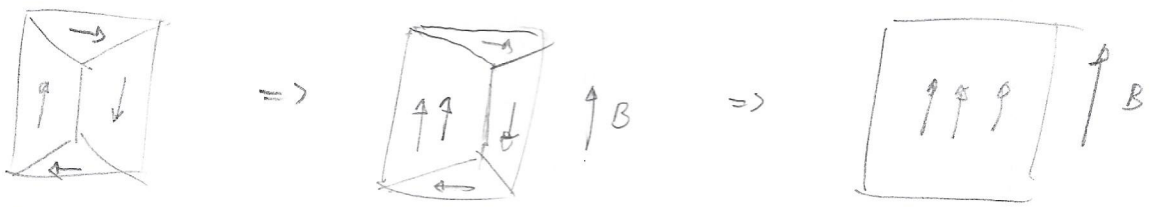
↝ Magnetização de um ferromagneto depende não apenas do estado presente, mas de sua história:



Ciclo de Histerese

↝ Amostra inicialmente desmagnetizada ⇒ domínios magnéticos orientados aleatoriamente a $B = 0$ (interação dipolar + troca)

↝ Aplicação de $B \neq 0$ faz crescer domínios c/ magnetização paralela a B até a saturação:



$B = 0$ Saturação (M_s)

↝ Diminuindo B, domínios se reformam, mas M não vai a zero quando $B = 0$ ⇒ remanência M_r.

↝ Deve-se aplicar um campo B_c contrário a M p/ zerar a magnetização ⇒ coercividade B_c

↝ Processo se repete até nova saturação e fechamento do ciclo.

↝ Anisotropia faz com que domínios se orientem em direções de fácil magnetização. Isto dita a formação de paredes de domínio.