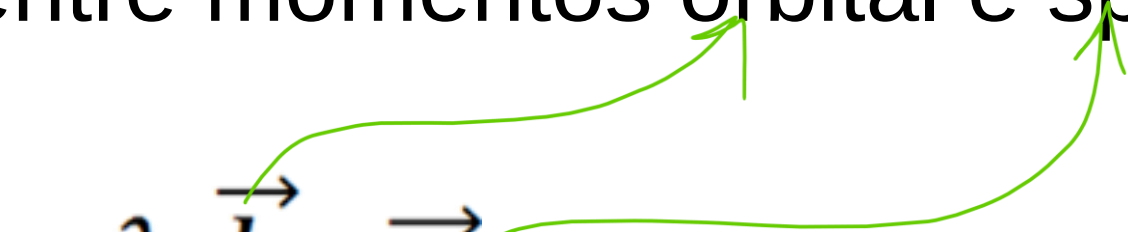


Interação Spin-Órbita (SO) e Anisotropia Magnética (AM)

Interação Spin-Órbita (SO)

Acoplamento ou Interação Spin-Órbita (Russel-Saunders)

- Interações entre momentos orbital e spin

$$-\lambda. \vec{l}_i \cdot \vec{s}_j$$
Two green arrows originate from the equation. One arrow starts from the vector $\vec{l}_i$ and points to the word 'orbital' in the text above. The other arrow starts from the vector $\vec{s}_j$ and points to the word 'spin' in the text above.

A interação é importante **em um mesmo átomo**: $i=j$

Em um único átomo de muitos elétrons ...

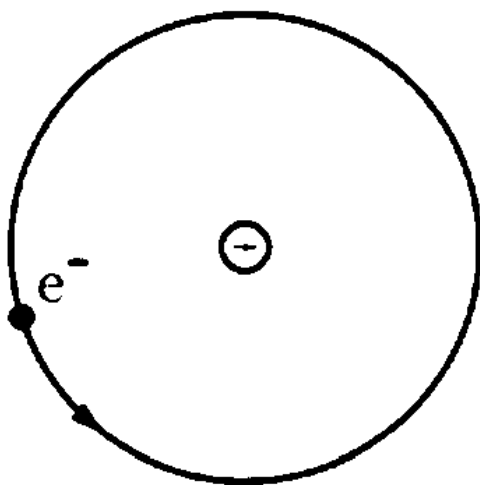
- **L interage com S**

- A energia de interação $H_{SO} = -\lambda \cdot \vec{L} \cdot \vec{S}$

- $\lambda < 0$, se a camada for preenchida menos que a metade.
 - $\lambda > 0$, se a camada for preenchida mais que a metade

Origem da Interação SO

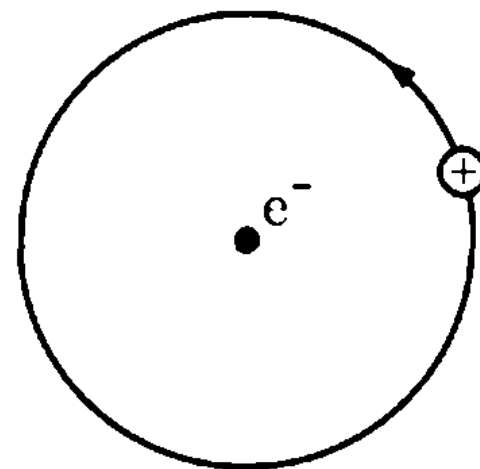
- Considere um elétron orbitando ao redor de um átomo.



- Referencial do núcleo

O átomo é mostrado em um quadro inercial com o elétron em repouso no qual o núcleo parece estar orbitando ao redor do elétron

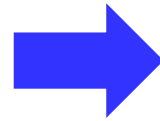
ou



- Referencial do elétron

- O núcleo em órbita constitui uma corrente que dá origem a um campo magnético igual a:

$$\mathbf{B} = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{v}}{c^2}$$



Esta equação vem da transformação de campos elétricos e magnéticos em relatividade especial.

$$\mathbf{E} = -\nabla V(r) = -\frac{\mathbf{r}}{r} \frac{dV(r)}{dr}$$

- O campo elétrico entre elétron e núcleo é dado por $\mathbf{E}$, sendo $V(r)$ é a energia potencial correspondente.
- c é a velocidade da luz
- v é a velocidade do núcleo.

- Este campo magnético $\mathbf{B} = \frac{\boldsymbol{\varepsilon} \times \mathbf{v}}{c^2}$, interage com o spin do elétron.
- Um termo extra pode ser inserido no Hamiltoniano.

$$H_{\text{so}} = -\frac{1}{2} \mathbf{m} \cdot \mathbf{B} \quad \rightarrow \text{Energia de interação SO}$$

Interação spin-órbita intrínseca, uma interação entre o spin e a parte orbital da função de onda de um elétron em um átomo.

$$-\lambda. \vec{L} \cdot \vec{S}$$

$$\bullet H_{SO} = -\lambda \cdot \vec{L} \cdot \vec{S}$$

$$\text{e } H_{SO} = -\frac{1}{2} \mathbf{m} \cdot \mathbf{B} \rightarrow \text{Energia de interação SO}$$

Onde:

$$\mathbf{m} = (ge\hbar/2m_e)\mathbf{S}$$

$$\mathbf{B} = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{v}}{c^2}$$

$$\mathbf{E} = -\nabla V(r) = -\frac{\mathbf{r}}{r} \frac{dV(r)}{dr}$$

λ depende da magnitude do campo elétrico entre o núcleo e o elétron e é inversamente à distância entre eles

$-\lambda$

$$H_{SO} = \left(\frac{e\hbar^2}{2rm_e^2c^2} \frac{dV(r)}{dr} \right) \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$$

Calculando $\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$

$$\rightarrow -\frac{1}{2} (ge\hbar/2m_e) \vec{S} \cdot \left[(-) \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \frac{\vec{r} \times \vec{v}}{c^2} \right]$$

$$\hbar \mathbf{L} = m_e \mathbf{r} \times \mathbf{v}$$

$$+ \frac{ge\hbar^2}{4m_e^2rc^2} \frac{dV}{dr} \cdot \vec{S} \cdot \vec{L}$$

$$g = 2$$

Anisotropia Magnética

(AM)

Anisotropia em sólidos

A propriedade física do material é
função da direção

Anisotropia Magnética (AM)

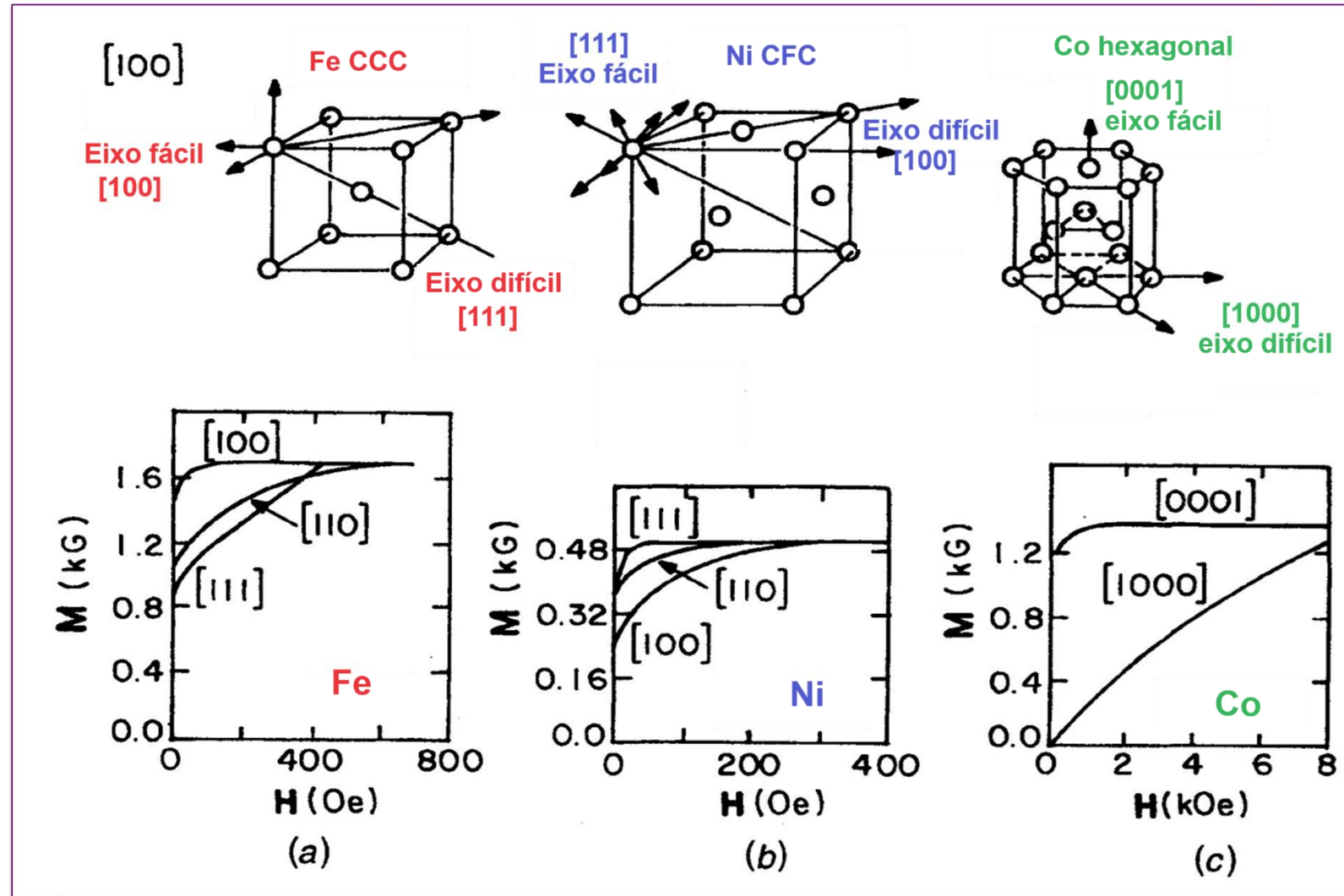
- **Anisotropia Magnetocristalina (AMC) – Intrínseca**
 - Define uma direção de fácil magnetização na rede cristalina
- **Anisotropia Extrínseca**
 - Forma da amostra (anisotropia de forma - AF)
 - Tensões Internas e Externas (anisotropia induzida/construída - AI)
- **AM se manifesta em χ (susceptibilidade magnética) ou μ (permeabilidade magnética)**

Anisotropia Magnetocristalina

- Os momentos magnéticos se alinham preferencialmente em uma dada direção da rede cristalina o que define a:
 - **direção de fácil magnetização**

Simetria Cristalina, Ordenamento de Pares Atômicos e SO

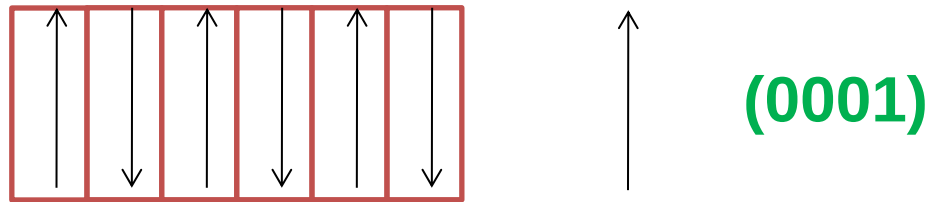
Anisotropia Magnetocristalina - monocristais



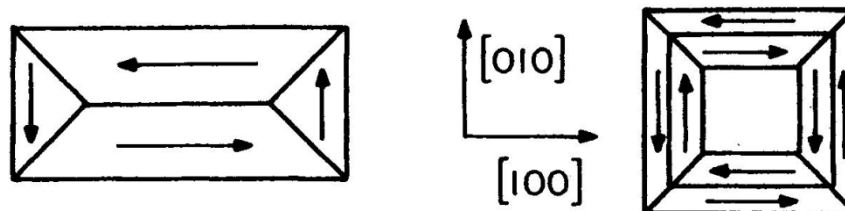
Anisotropia Magnetocristalina

Domínios

- 1) Anisotropia Uniaxial – Co
 - Preferência de magnetização em uma só direção em dois sentidos .



- 2) Anisotropia Cúbica - Fe e Ni
 - Preferência de magnetização em 3 direções em 6 sentidos .



Origem da Anisotropia Magnetocristalina

Como os momentos magnéticos locais distinguem entre direções cristalográficas diferentes?

Ou em outras palavras

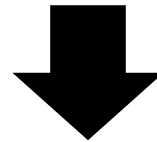
Como o momento magnético se acopla à rede?

Interação Spin-Órbita (spin acoplado à forma e orientação do orbital)

+

Ligações Químicas e meio externo (campo cristalino)

Se o campo cristalino é de baixa simetria (assimétrico) e se os elétrons da ligação entre átomos têm distribuição de carga assimétrica ($L_z \neq 0$)



- Os orbitais atômicos interagem com o campo cristalino de baixa simetria criando uma anisotropia nos orbitais.**
 - A anisotropia dos orbitais causará uma anisotropia na distribuição do spin que acompanham a órbita devido à interação SO.**
-
- Ou seja, certas orientações dos orbitais moleculares ou da distribuição de carga dos elétrons ligantes são energeticamente favoráveis**

Anist Magnetocristalina + Aplicação de Campo (H)

- O campo H causará um torque em μ_s , mas S continuará acoplado a L. Há duas energias envolvidas:
 - A energia do campo cristalino (D): que acopla L à rede
 - Interação Spin-Órbita: $\lambda L.S$

Caso 1) $D > \lambda L.S$ – metais de transição e ligas metálicas

μ_s “sentirá” influência de H, enquanto que μ_L é praticamente “quenched”, isto é, preso a uma dada direção do campo cristalino ($L=0$).

Caso 2) $\lambda L.S > D$ – terras raras

$\mu_J = \mu_s + \mu_L$ acoplados “sentem” a influência de H, pois L não é tão fortemente ligado ao campo cristalino.

Anisotropia Uniaxial

- Outros materiais além do Co: $\text{Fe}_{14}\text{Nd}_2\text{B}_1$, ferritas de Bário, etc.
- Para um material uniaxial:

$$E = K_1 \cos^2 \theta$$

Ou seja, a menor energia é na direção de fácil magnetização.

– Onde θ é o ângulo entre a direção de fácil magn.

- Se M é paralelo a o eixo c: $\theta = 0^\circ$ e $\rightarrow E = K_0$
- Se M está no plano basal: $\theta = 90^\circ$ e $\rightarrow E = K_0 + K_1 + K_2 + \dots$
- Para o cobalto:

$$K_1 = 4,1 \times 10^5 \text{ J/m}^3 \text{ e } K_2 = 1,5 \times 10^5 \text{ J/m}^3$$

Anisotropia Cúbica

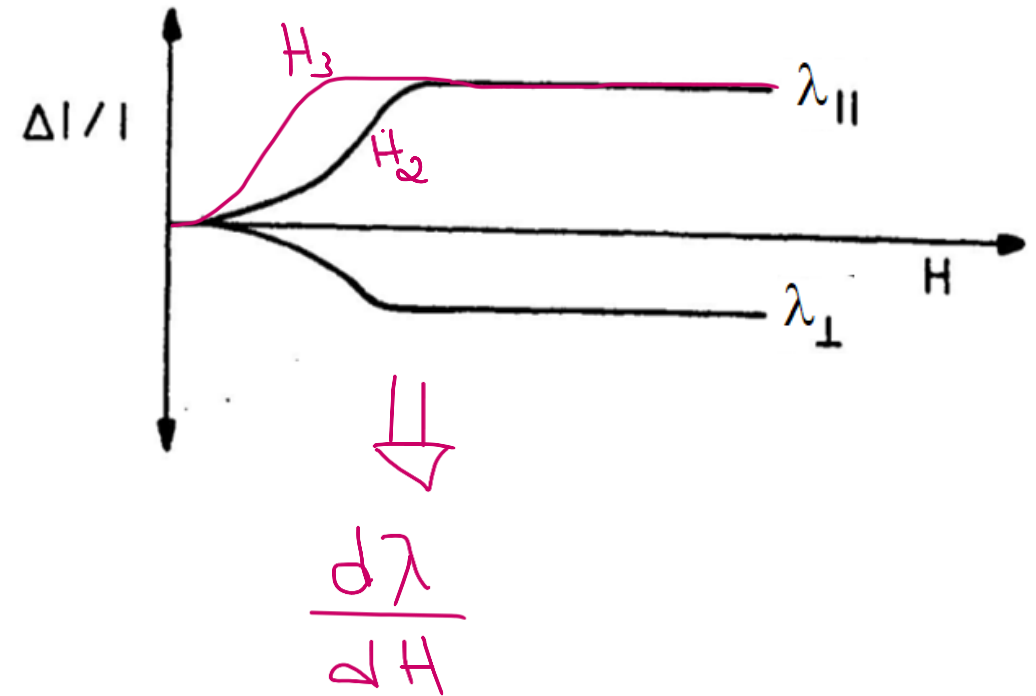
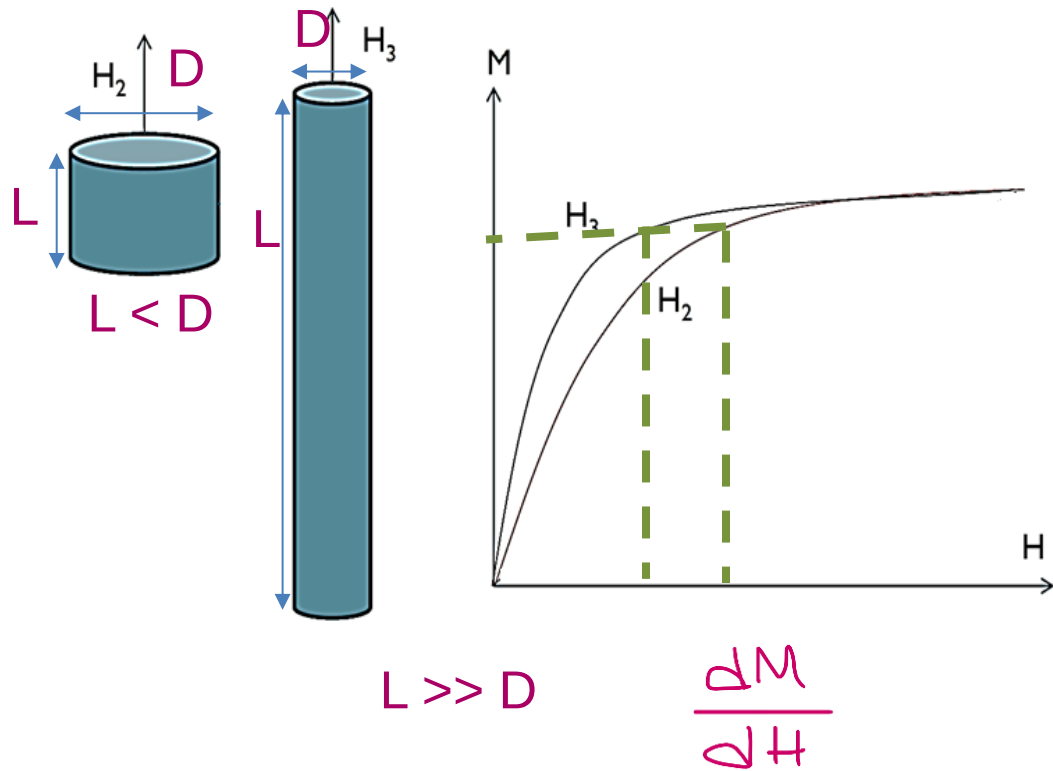
$$E = K_0 + K_1(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_1^2\alpha_3^2) + K_2\alpha_1^2\alpha_2^2\alpha_3^2 \dots$$

- $K_1 = 5 \times 10^4 \text{ J/m}^3$ e $K_2 \ll K_1$ para o Fe.
- Dependem dos cossenos diretores da magnetização α_1 (x), α_2 (y) e α_3 (z), que são os cossenos entre a magnetização as direções $[\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3]$.

Anisotropia de Forma

- Um material policristalino sem orientação preferencial dos grãos, a anisotropia magnetocristalina resultante pode ser considerada ≈ 0 .
- No entanto, somente se a amostra for esférica, o campo irá magnetizar a amostra da mesma maneira em todas as direções.
- Se não for esférica, será mais fácil magnetizar a amostra na direção do eixo mais longo → **anisotropia de forma**

Anisotropia de forma



Influência da forma da amostra no processo de magnetização

A razão de aspecto (L/D) da amostra influencia na medida de magnetização; L é o comprimento e D é a largura ou diâmetro.

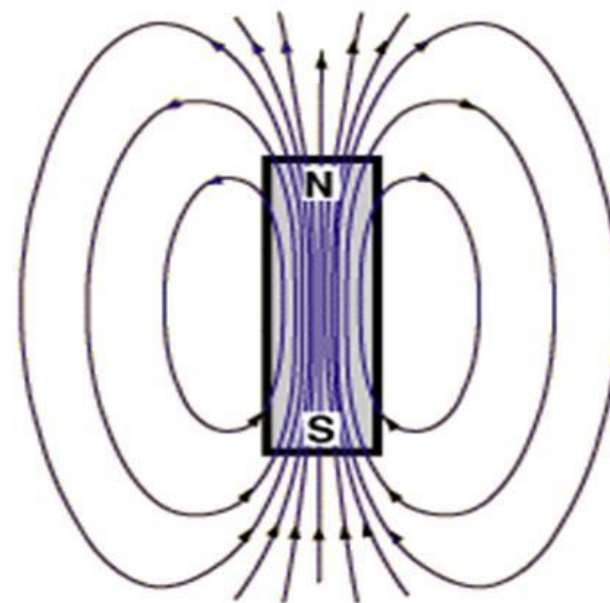
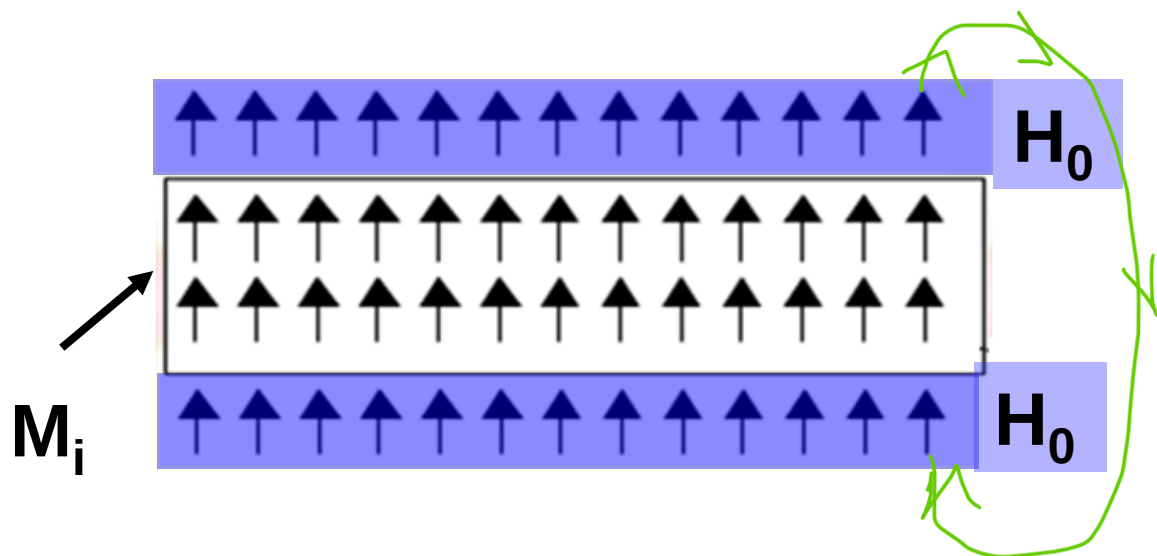
- ❑ O campo de desmagnetização provoca um efeito de deslocamento na curva de magnetização inicial e de magnetostricção inicial.
- ❑ Consequentemente tem efeito sobre o valor da permeabilidade inicial ou a susceptibilidade e do fator de atuação $k = d\lambda/dH$.

Anisotropia de Forma

- somente se a amostra for esférica, o campo irá magnetizar a amostra da mesma maneira em todas as direções.
- Se não for esférica, será **mais fácil (menor campo H)** magnetizar (saturar) a amostra na direção do eixo mais longo → **anisotropia de forma**

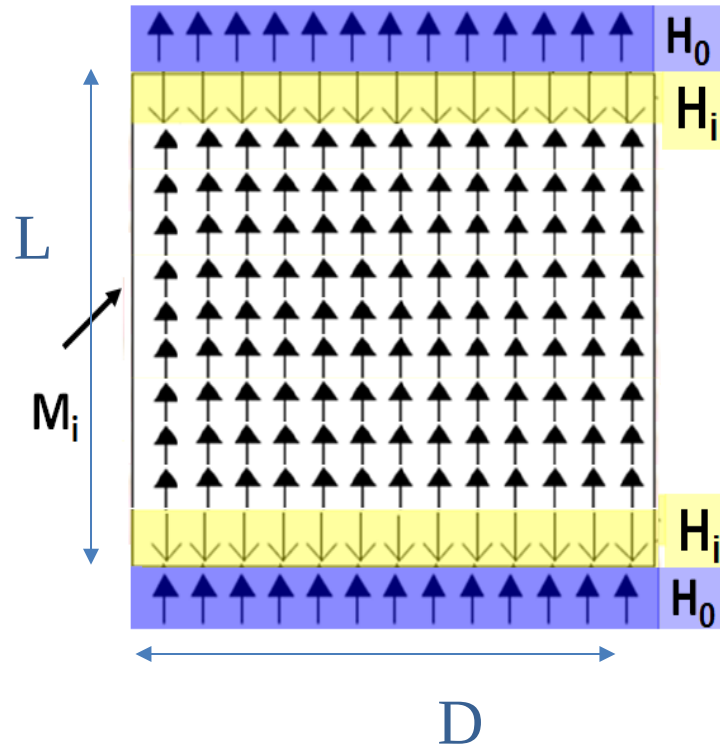
O que é este efeito de desmagnetização?

Considere um material magnetizado por um campo magnético H_0

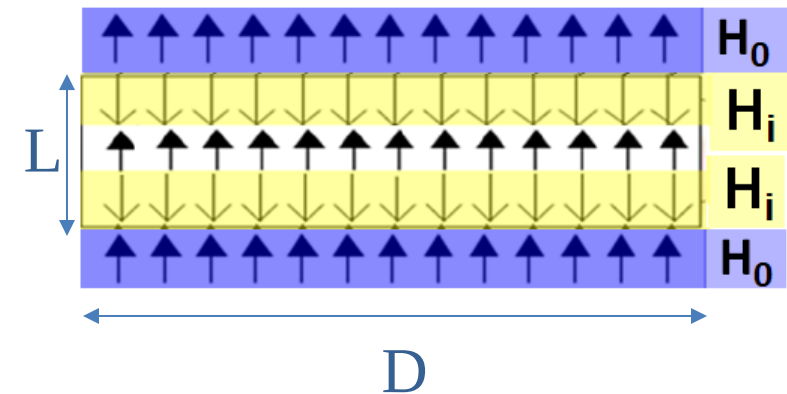


razão de aspecto = L/D

Para um objeto $L > D$ (fino e longo), o campo de desmagnetização ao longo do eixo longo é fraco porque os polos são bem separados.
 $M_i \gg 2H_i$

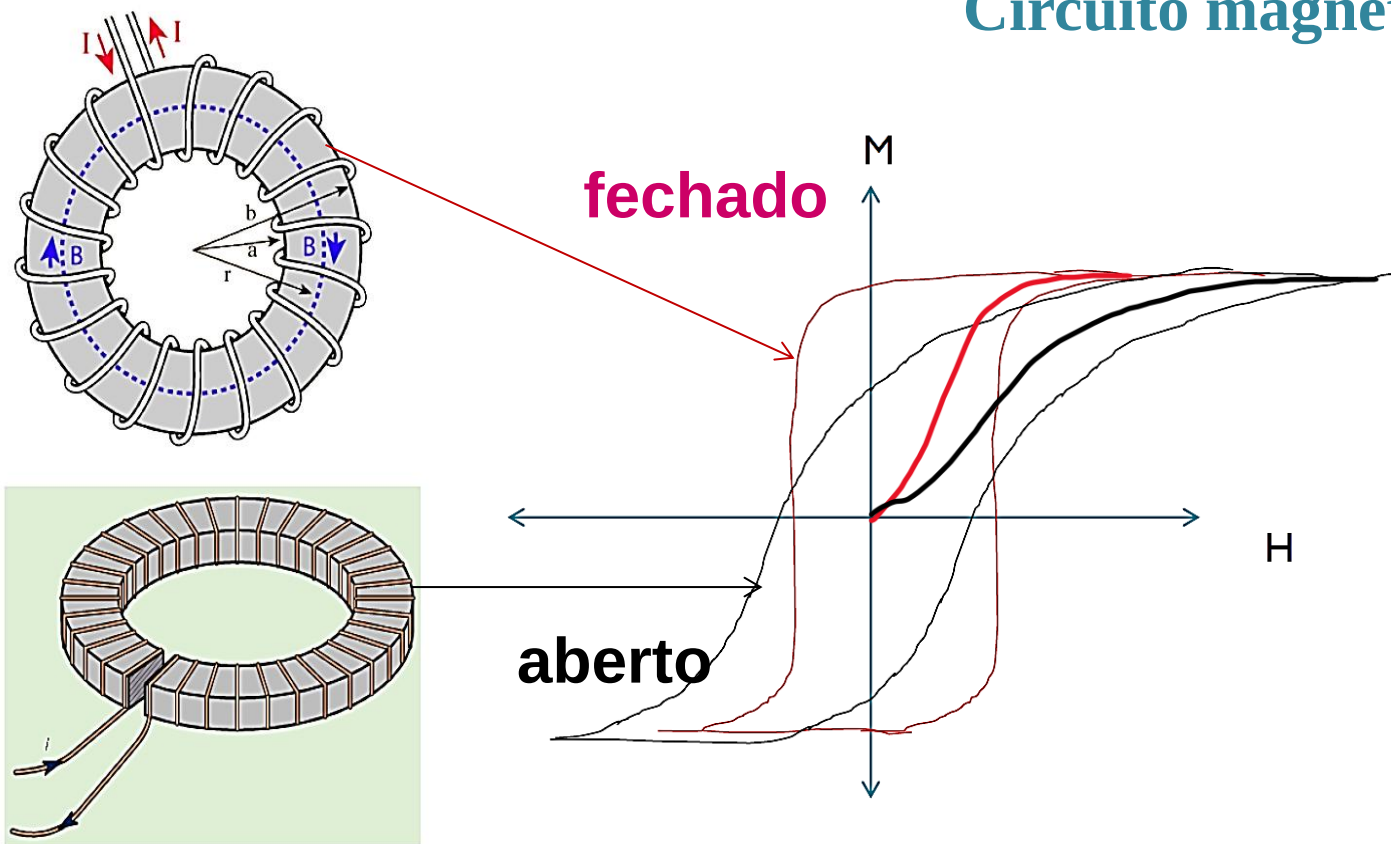


Para um objeto onde $L < D$, o campo de desmagnetização é grande porque os polos induzidos são próximos. $M_i > \approx 2H_i$



Como evitar o efeito de desmagnetização?

Circuito magnético fechado



Anisotropia de Forma

Campo de desmagnetização

Magnetização - M

Campo de desmagnetização - H_d

$$\vec{H}_d = N_d \vec{M} \quad \Rightarrow \quad \vec{H}_i = \vec{H}_{ef} = \vec{H}_{ap} - N_d \vec{M}$$

H_i = campo interno ou campo efetivo H_{ef}

N ou N_d = fator de desmagnetização; depende da geometria da amostra, da permeabilidade magnética.

Circuito Magnético fechado:

$$H_i = H_{aplic} - NM$$

$$M = \chi H_{aplic} = \chi H; \quad (N = 0 \text{ e } \chi \text{ é a susceptibilidade intrínseca do material})$$

Circuito Magnético aberto

$$M = \chi_a H_{aplic}; \quad \chi_a \text{ é a susceptibilidade aparente}$$

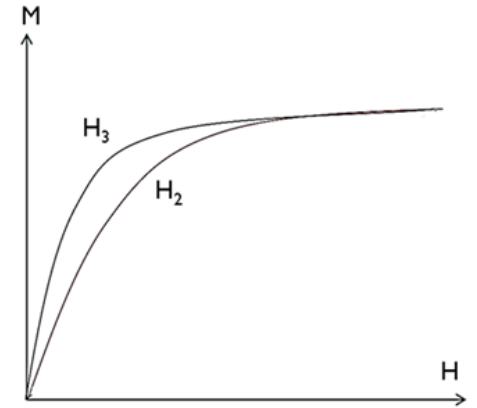
Substitui $H_{aplic} = H_i + NM$ em M



$$M = \chi_a (H_i + NM)$$



$$M(1 - \chi_a N) = \chi_a H_i \rightarrow M = \frac{\chi_a}{(1 - \chi_a N)} H_i$$



$$\chi = \frac{\chi_a}{(1 - \chi_a N)}$$

Fatores de Desmagnetização - Barras cilíndricas e quadradas

Barra quadrada

Razão de aspecto n	N_d
0.1	0.833333
0.2	0.714286
0.3	0.625000
0.5	0.500000
0.7	0.416667
1	0.333333
2	0.200000
3	0.142857
5	0.090909
7	0.066667
10	0.047619
12	0.040000
15	0.032258
20	0.024390
30	0.016393
50	0.009901
70	0.007092
100	0.004975

Barra redonda

Razão de aspecto n	N_d
0.1	0.815876
0.2	0.689013
0.3	0.596293
0.5	0.469841
0.7	0.387637
1	0.307054
2	0.181372
3	0.128696
5	0.081408
7	0.059533
10	0.042431
12	0.035611
15	0.028693
20	0.021675
30	0.014555
50	0.008784
70	0.006290
100	0.004412

↑ Razão de aspecto =
 $\frac{\text{dimensão longitudinal (L)}}{\text{dimensão transversal (D)}}$



Anisotropia Induzida

Não é uma propriedade intrínseca do material.

- Produzida por processamentos que causem uma característica direcional na microestrutura → grande potencial para “engenheirar” as propriedades magnéticas.
- Interessante para materiais policristalinos.

Anisotropia Induzida

Processos

- Solidificação direcional
- Laminação seguida de recozimento de chapas;
- Forjamento rotativo e trefilação de fios e barras cilíndricas seguidos de tratamento térmico.
- Recozimento sob campo magnético
- Recozimento sob tensão mecânica