

# Interação de troca

**Materiais óxidos**

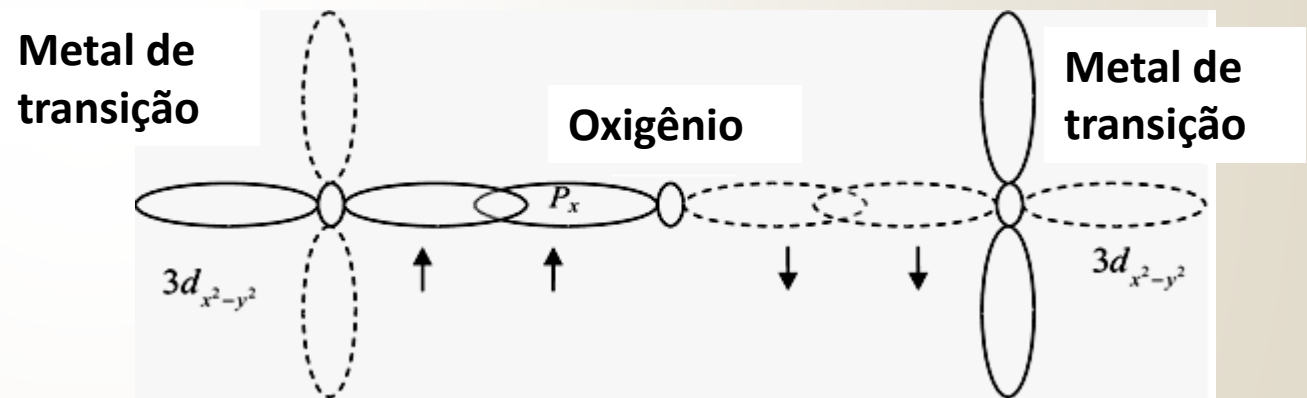


# Óxidos

- Estados eletrônicos são mais do tipo localizados – materiais isolantes
- Os elétrons em óxidos podem ser descritos pelos mesmos números quânticos que se aplicam aos átomos isolados (Multipletos)

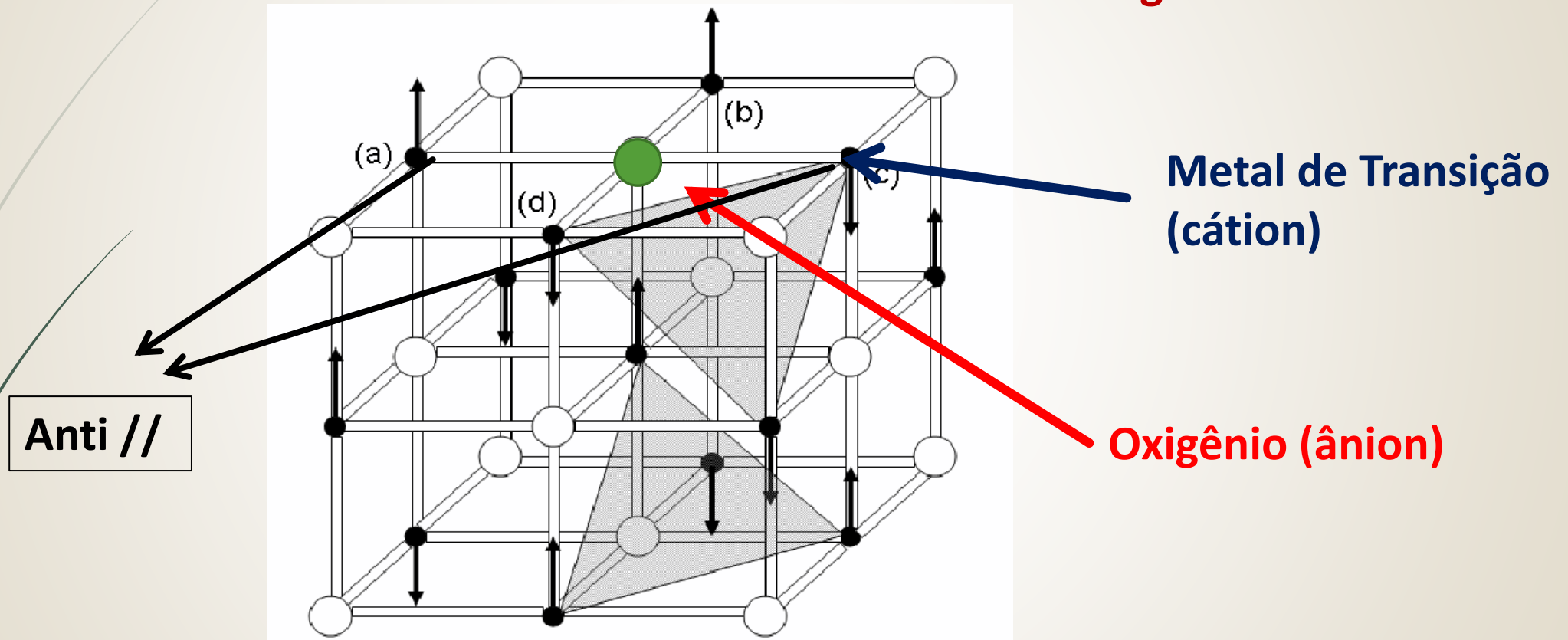
# Interação de Troca em Óxidos Superexchange - Supertroca

- ❖  $O^{-2} \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 \rightarrow$  troca elétrons com os orbitais 3d;
- ❖ A ligação é do tipo iônica, mas alguns saltos acontecem;
- ❖ Os saltos conservam a orientação do spin.



# Óxidos de Metais de Transição (T)-O com T = Mn, Fe, ...

Estrutura Magnética = AFM



Estrutura cristalina Rocksalt

# Fe-O (wustita)

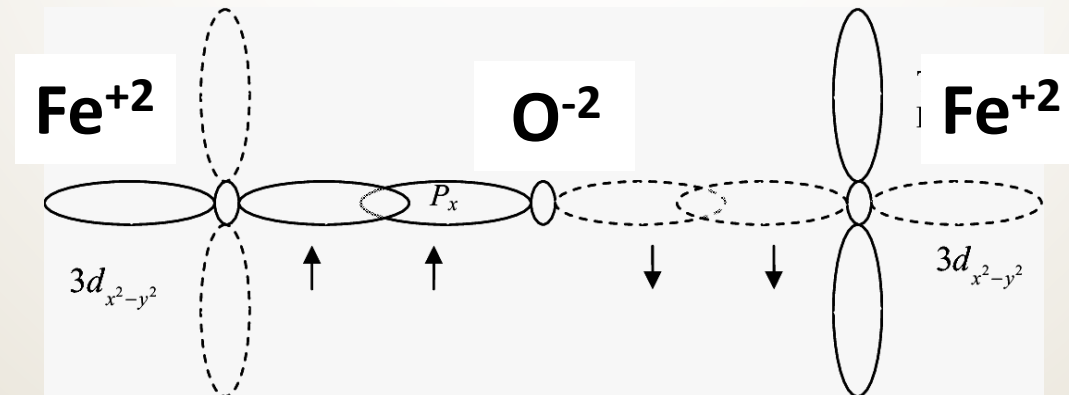
➔ Estrutura “Rocksalt”

➔  $\mu_m = 4 \mu_B$      $\text{Fe}^{+2} = 4s 3d^6$  ( $\Rightarrow 4 \mu_B$ )

➔ **AFM**

Propriedade magnética FeO  $\Rightarrow 4 \mu_B \Rightarrow \text{Fe}^{+2} - \text{O}^{-2}$

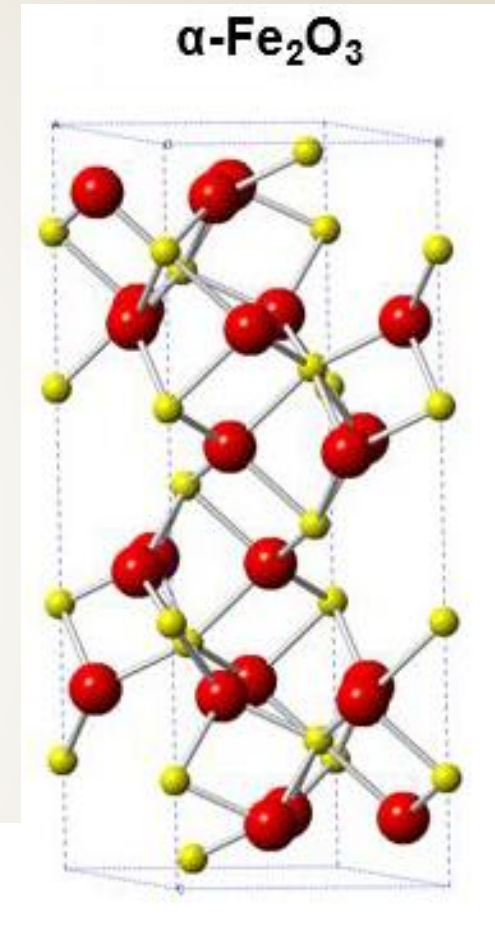
$\text{O}^{-2} = 2p^6$  ( $\mu = 0$ )



# $\alpha$ - $\text{Fe}_2\text{O}_3$ (hematita)

➤ Estrutura Corundum - hexagonal

➤ **AFM**



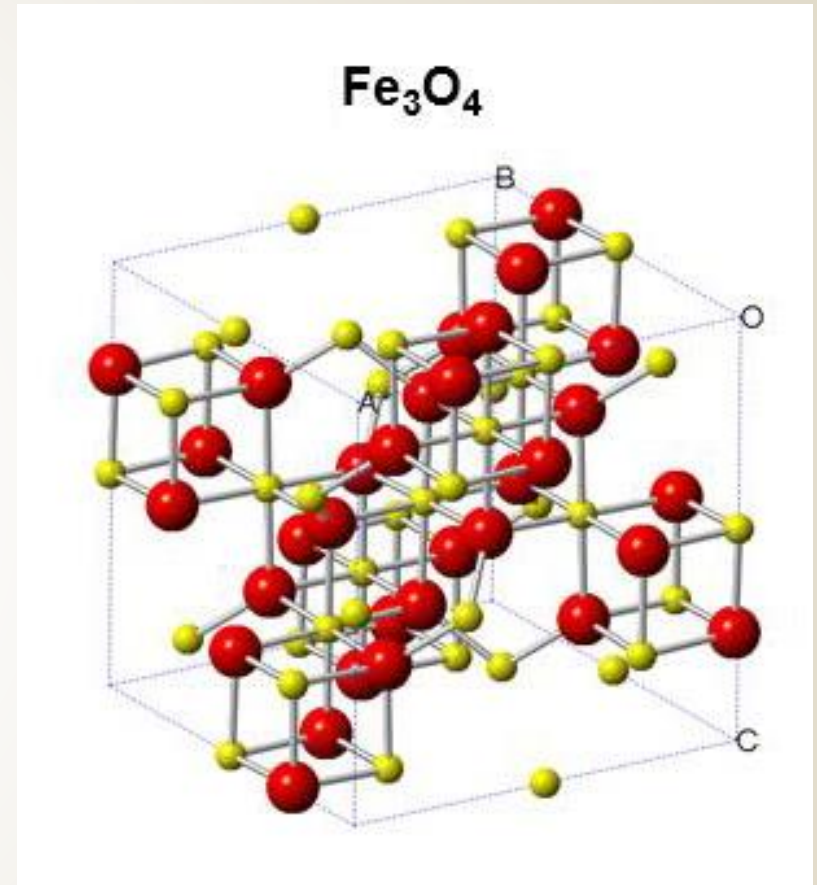


# $\text{FeO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3 - \text{Fe}_3\text{O}_4$ (Magnetita (ferrita))

➤ Estrutura Spinel inversa

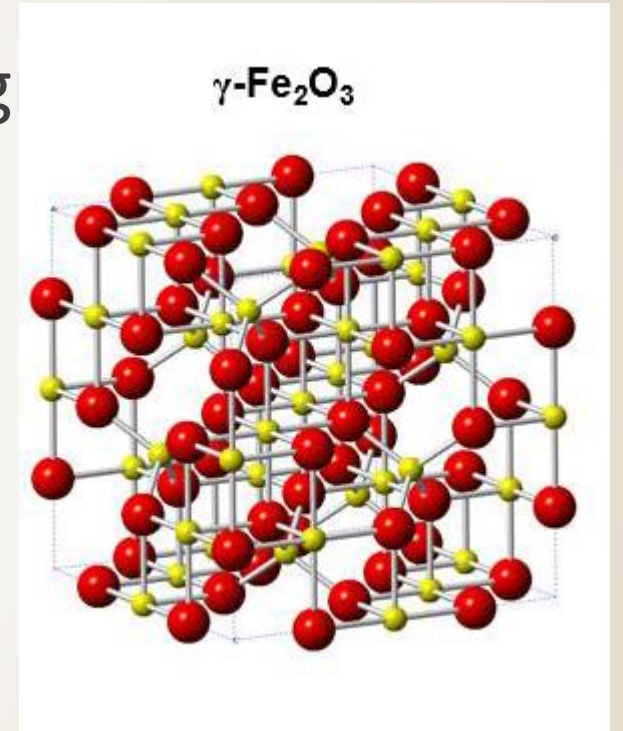
➤  $\mu_m = 4.1 \mu_B$

➤ **Comportamento FM;**  
**ferrimagnético**



# Óxidos de ferro – $\gamma$ - $\text{Fe}_2\text{O}_3$ (Maghemita)

- Mineral intermediário da transformação mag (  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  ) – hematita (  $\alpha$  -  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  )
- Estrutura spinel metaestável
- $\mu_m = 5 \mu_B$
- **FM**





# Interação de troca em íons e átomos isolados: **elétrons bem localizados** nos sítios iônicos/atômicos

- “Pulos” ou caráter itinerante (elétrons de condução): insipientes
- Tratamento Quântico:
  - Super-troca
  - Troca de Heisenberg: A interação elétron-elétron existe, mas é fraca (separação é grande entre os íons)