

Chapter 6

Magnetismo

A Nação que controla o magnetismo, controla o Universo (Dick Tracy).

6.1 Origem do Magnetismo na Matéria

Até tu Dick Tracy...

Materiais magnéticos ocupam uma posição de destaque na indústria. Suas aplicações vão de enfeites e fechaduras, passam por núcleos de motores e transformadores, até discos rígidos e outros meios de gravação e leitura magnética. A indústria do magnetismo é ainda mais rica do que a de semicondutores! Além disso, o fenômeno do magnetismo é tão fascinante quanto complexo, e tem sido o “ganha-pão” de muita gente. Do ponto de vista técnico, este capítulo talvez seja o de mais difícil leitura deste livro. Vários conceitos, como funções de onda simétrica e antissimétrica, spins, redes cristalinas, etc., que foram desenvolvidos nos últimos três capítulos, são postos juntos no presente capítulo. Recomendo ao leitor uma rápida olhada nos resumos dos capítulos anteriores antes de prosseguir com este.

O estudo do magnetismo é uma sub-área da Matéria Condensada (assim como a física dos semicondutores). Dentro desta sub-área existem várias especializações: tem gente que estuda metais magnéticos, tem gente que estuda isolantes magnéticos, há aqueles que estudam o magnetismo somente do ponto de vista macroscópico, há outros que só querem saber da abordagem microscópica, tem gente somente interessada nas aplicações práticas do magnetismo, outros que só estudam o magnetismo nuclear, etc. No entanto, assim como as diferenças entre metais, isolantes e semicondutores estudadas no capítulo anterior não podem ser compreendidas classicamente, com o magnetismo ocorre o mesmo: a diferença entre um material magnético e não magnético, e as diferenças de propriedades entre aqueles que são magnéticos não podem ser compreendidas com a física clássica. O mundo é de fato quântico!

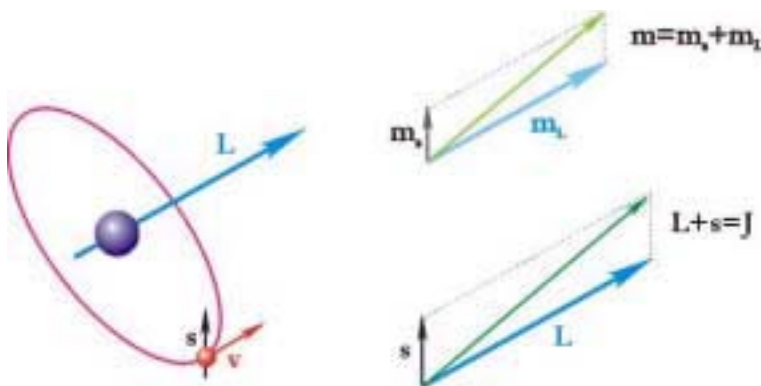
No capítulo quatro falamos do magnetismo no átomo. A grandeza fundamental do magnetismo na matéria é o momento magnético \mathbf{m} . Se um átomo possui momento magnético diferente de zero, este é um bom começo para que um sólido formado a partir desses átomos venha a ser magnético, embora somente isso não seja suficiente. Recordando, o momento magnético de um átomo possui duas origens: uma associada ao seu momento angular orbital, \mathbf{L} , e outra associada ao spin, \mathbf{S} . Em uma camada atômica vazia ou totalmente cheia, ambos, \mathbf{S} e \mathbf{L} , se anulam. Em uma semi-cheia, somente \mathbf{L} se anula. Nos outros casos \mathbf{S} e \mathbf{L} são diferentes de zero. Podemos escrever essas duas contribuições para o momento magnético de um átomo como:

$$\mathbf{m}_L = g_L \mathbf{L}$$

$$\mathbf{m}_S = g_s \mathbf{S}$$

onde g_L e g_s são fatores de proporcionalidade. O momento magnético total de um átomo será simplesmente a soma vetorial das duas contribuições:

$$\mathbf{m} = \mathbf{m}_L + \mathbf{m}_S$$



Em um átomo os momentos angulares de spin e orbital se combinam para dar origem ao momento angular total \mathbf{J} . O mesmo acontece com o momento magnético total do átomo.

Podemos ir um pouco mais adiante definindo o *momento angular total* de um átomo, \mathbf{J} , como a soma do seu momento orbital com o spin:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

Com esta definição é possível escrever o momento magnético total do átomo como:

$$\mathbf{m} = g_J \mathbf{J}$$

onde g_J , como anteriormente, é um fator de proporcionalidade. Note que até agora não fizemos mais do que definir quantidades atômicas como somas vetoriais. Imagine então uma rede cristalina onde cada átomo possui um momento magnético diferente de zero. Para poderemos afirmar se o material é magnético ou não, precisamos definir uma grandeza *macroscópica*, chamada *magnetização*, \mathbf{M} . Esta é simplesmente o número de momentos magnéticos por unidade de volume¹:

$$\mathbf{M} = \frac{1}{V} \sum_i \mathbf{m}_i$$

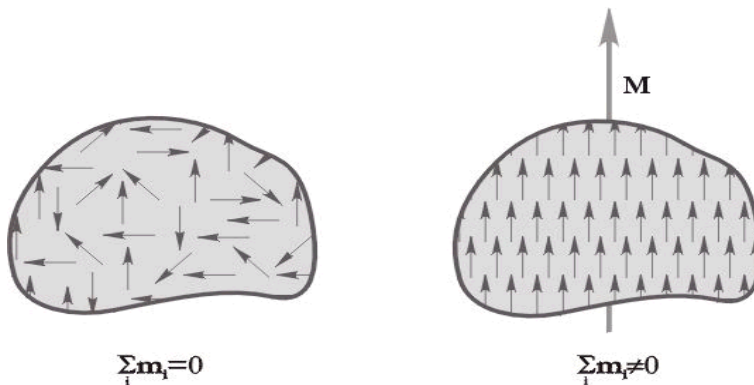
onde \mathbf{m}_i é o valor do momento magnético do i -ésimo átomo na rede, e V é o volume do material. Dizemos que o material está *magneticamente ordenado* ou possui *ordem magnética* se a magnetização for diferente de zero. A definição acima nos será útil, embora ela não seja rigorosa. Em alguns casos especiais \mathbf{M} pode ser zero, e mesmo assim existir ordem magnética.

A partir de sua definição vemos que existem duas possibilidades para que \mathbf{M} seja zero: ou a soma sobre os momentos magnéticos \mathbf{m}_i é zero, ou cada momento \mathbf{m}_i se anula individualmente (lembre que mesmo que cada \mathbf{m}_i seja diferente de zero, sua soma pode se anular).

¹Mais precisamente, a magnetização é o limite desta expressão quando o volume tende a zero:

$$\mathbf{M} = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{1}{V} \sum_i \mathbf{m}_i$$

O caso em que cada momento magnético se anula individualmente é desinteressante do ponto de vista do magnetismo; são materiais *não magnéticos*, como água ou o sal de cozinha. O caso em que os átomos possuem momento magnético, ou seja, $\mathbf{m}_i \neq 0$, mas \mathbf{M} é igual a zero, é chamado de *paramagnetismo*². Dizemos então que o material com esta propriedade é *paramagnético*. Finalmente, o caso em que \mathbf{M} é diferente de zero é o mais interessante do ponto de vista do magnetismo. Dizemos que o material é *magneticamente ordenado*. Este é, por exemplo, o caso do ferro metálico.



Diz-se que um material apresenta ordenamento magnético se os momentos atômicos estiverem espacialmente ordenados.

Existem diversos tipos de ordem magnética, algumas das quais serão revistas na próxima seção. No momento o que nos preocupa é a

²Existe, contudo, um interessante caso em que $\mathbf{M} = 0$, mas existe ordem magnética, como será mencionado adiante.

seguinte pergunta: qual a condição para que os momentos magnéticos dos átomos de um material se tornem espacialmente ordenados? Por exemplo, no estranho composto $\text{Gd}(\text{C}_2\text{H}_5\text{SO}_4)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$, um sal de gadolínio (Gd), os átomos de Gd possuem momento magnético diferente de zero, mas a magnetização é igual a zero, ou seja, o material é paramagnético. Já o gadolínio, na sua forma metálica, possui ordem magnética. Por que os momentos magnéticos do Gd no sal acima não se ordenam, mas no metal eles se ordenam? Não é fácil responder a esta pergunta, porque a origem da ordem magnética nos materiais é inteiramente quântica, e consideravelmente sutil. De fato, a origem da ordem magnética nos materiais está associada à interação coulombiana entre os elétrons de átomos vizinhos na rede cristalina (ou seja, uma interação elétrica!) e ao princípio de exclusão de Pauli. Repare como o princípio de exclusão é recorrente! Ele é necessário para entendermos a ocupação dos níveis de energia em um átomo (capítulo quatro), para explicar as diferenças entre metais, isolantes e semicondutores (capítulo cinco), e agora para explicar a origem do magnetismo. A razão é que em todos esses problemas estamos lidando com vários elétrons, e conseqüentemente temos que evocar o princípio de exclusão.

Considere dois elétrons pertencentes a átomos vizinhos em uma rede cristalina, com vetores de posição \mathbf{r}_1 e \mathbf{r}_2 , e funções de onda atômicas ψ_α e ψ_β , onde α e β designam genericamente estados quânticos dos elétrons. A distância entre os elétrons, representada por r_{12} , será dada por $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Sabemos do princípio de exclusão que, independentemente de os elétrons interagirem ou não entre si, a função de onda total do sistema tem que ser antissimétrica. Mesmo sem especificarmos

as formas funcionais das funções espaciais ψ_α e ψ_β , podemos construir a partir delas uma função simétrica e outra antissimétrica, que vamos denotar, respectivamente, por ψ_S e ψ_A :

$$\psi_S = \psi_\alpha(\mathbf{r}_1)\psi_\beta(\mathbf{r}_2) + \psi_\alpha(\mathbf{r}_2)\psi_\beta(\mathbf{r}_1)$$

$$\psi_A = \psi_\alpha(\mathbf{r}_1)\psi_\beta(\mathbf{r}_2) - \psi_\alpha(\mathbf{r}_2)\psi_\beta(\mathbf{r}_1)$$

Vemos que ψ_A troca de sinal sob uma permuta de \mathbf{r}_1 com \mathbf{r}_2 , mas o mesmo não acontece com ψ_S . Como a função total tem que ser antissimétrica, se os elétrons estiverem no estado representado por ψ_S , a sua função de spin terá que ser antissimétrica, o que significa que os spins serão opostos. Analogamente, se o estado orbital for dado por ψ_A , a função de spin terá que ser simétrica, ou seja, os dois spins serão paralelos. Tudo isso já havia sido comentado no capítulo três.

Vamos agora considerar o que acontece quando incluímos a interação eletrostática entre os elétrons. Sabemos do capítulo um que a interação coulombiana entre dois elétrons é dada por:

$$V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_{12}}$$

onde r_{12} é a distância entre eles, definida acima. Acontece que nem posições nem distâncias possuem valores precisos em mecânica quântica, mas somente suas médias. Se medíssemos r_{12} várias vezes, encontraríamos valores diferentes em cada medida (os autovalores), e o que teria significado seria a média desses valores. Conseqüentemente, como a energia potencial V é uma função de r_{12} , ela também possuirá um

valor médio. Mas como vimos no capítulo três, valores médios são calculados usando-se funções de distribuição de probabilidades, que por sua vez são dadas pelos módulos quadrados das funções de onda. Como no caso que estamos tratando temos duas possibilidades para a função de onda, ψ_S ou ψ_A , teremos também duas funções de distribuição de probabilidades:

$$|\psi_S|^2 \text{ ou } |\psi_A|^2$$

Obviamente o resultado para o valor médio de V , calculado a partir dessas distribuições dependerá da escolha da função. Designaremos o valor médio da energia potencial V por $\langle V \rangle$. A maneira formal para calcularmos esta quantidade seria multiplicarmos V por $|\psi_S|^2$ (ou $|\psi_A|^2$) e somarmos sobre todas as posições dos elétrons. O procedimento de soma é complicado, pois como as posições dos elétrons variam continuamente no espaço, teríamos que utilizar o procedimento de integração de uma função, descrito no Painel IV (capítulo um). No entanto, para os nossos propósitos, é suficiente usarmos um argumento apenas semi-quantitativo.

Do que foi dito vemos que o valor médio da energia potencial entre os elétrons dependerá do estado do conjunto ser simétrico ou antisimétrico. Mas, se o estado orbital for simétrico, a função de spin terá que ser antissimétrica; e se o estado orbital for antissimétrico, a função de spin terá que ser simétrica. Conseqüentemente, *a energia coulombiana média entre os elétrons dependerá do seu estado de spin*. Note a mágica deste argumento: começamos com uma interação que só depende das posições relativas entre os elétrons, r_{12} , e acabamos desco-

brindo que o seu valor esperado também depende do spin! Isso ocorre precisamente por causa do princípio de exclusão.

Podemos ir um pouco mais adiante com as duas distribuições de probabilidades acima. Por simplicidade vamos supor que ψ_α e ψ_β são funções reais, ou seja, $\psi_\alpha^* = \psi_\alpha$, e $\psi_\beta^* = \psi_\beta$. Conseqüentemente:

$$\begin{aligned} |\psi_S|^2 &= \psi_S^* \psi_S = \psi_S^2 = \\ &= [\psi_\alpha(\mathbf{r}_1)\psi_\beta(\mathbf{r}_2) + \psi_\alpha(\mathbf{r}_2)\psi_\beta(\mathbf{r}_1)]^2 \\ &= \psi_\alpha(\mathbf{r}_1)^2\psi_\beta(\mathbf{r}_2)^2 + \psi_\alpha(\mathbf{r}_2)^2\psi_\beta(\mathbf{r}_1)^2 + 2\psi_\alpha(\mathbf{r}_1)\psi_\beta(\mathbf{r}_2)\psi_\alpha(\mathbf{r}_2)\psi_\beta(\mathbf{r}_1) \end{aligned}$$

Cada um desses termos representa uma parcela da distribuição de probabilidades para as posições das partículas 1 e 2 no estado ψ_S . O primeiro termo, por exemplo:

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}_1)^2\psi_\beta(\mathbf{r}_2)^2$$

representa uma distribuição de probabilidades onde o elétron 1 se encontra no estado α e o elétron 2 no estado β . Da forma análoga, o segundo termo

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}_2)^2\psi_\beta(\mathbf{r}_1)^2$$

representa uma distribuição em que cada elétron está em um estado distinto: o elétron 1 em β e o elétron 2 em α . Quando usados para calcular o valor médio de V , esses dois termos fornecem o análogo clássico do potencial eletrostático³. Vamos chamar este termo de V_0 :

³Ou seja, fornecem um valor para a energia eletrostática igual ao que seria obtido se os dois elétrons fossem tratados como partículas clássicas.

$$V_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\langle r_{12} \rangle}$$

onde $\langle r_{12} \rangle$ é o valor médio de r_{12} , calculado a partir dos dois primeiros termos de $|\psi_S|^2$.

A grande novidade aparece quando consideramos a contribuição do último termo:

$$2\psi_\alpha(\mathbf{r}_1)\psi_\beta(\mathbf{r}_2)\psi_\alpha(\mathbf{r}_2)\psi_\beta(\mathbf{r}_1)$$

Este termo é uma consequência direta do princípio de exclusão. Ele representa uma situação estranha em que o elétron 1 se encontra parcialmente no estado α , através da função $\psi_\alpha(\mathbf{r}_1)$, e parcialmente no estado β , através de $\psi_\beta(\mathbf{r}_1)$, o mesmo ocorrendo para o elétron 2. Ou seja, este termo descreve uma *troca de estados* dos elétrons 1 e 2 entre os estados quânticos α e β . Sua contribuição para o valor médio de V , é chamada de *energia de troca* (a origem do nome é evidente!). A energia de troca é um efeito de natureza puramente quântica, ou seja, não possui análogo clássico. Representaremos a energia por J_{troca} . Então, agrupando todos os termos, e tendo em conta que os dois primeiros contribuem com o mesmo valor V_0 , podemos escrever a energia coulombiana média, $\langle V \rangle$, como:

$$\langle V \rangle = 2V_0 + 2J_{troca}$$

Se tivéssemos usado ψ_A ao invés de ψ_S , teríamos obtido o seguinte resultado:

$$\langle V \rangle = 2V_0 - 2J_{troca}$$

Este é um resultado importante, pois ele mostra que o valor médio da energia coulombiana será aumentado ou reduzido de $2J_{troca}$, em relação a $2V_0$, dependendo da simetria da função de onda. Mas, como a simetria da função de onda depende do estado de spin dos elétrons, podemos dizer que o valor de $\langle V \rangle$ dependerá em última instância dos spins \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_2 . Este fato sugere que talvez pudéssemos obter uma expressão para $\langle V \rangle$ escrita explicitamente em termos dos spins dos elétrons.



A interação de troca aparece da superposição de funções de onda de átomos próximos. Este efeito puramente quântico é a base para a compreensão da ordem magnética nos materiais.

Podemos de fato escrever $\langle V \rangle$ como função dos spins eletrônicos. Como estamos lidando com dois elétrons, teremos $S_1 = S_2 = 1/2$. Utilizando o produto escalar entre \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_2 , é fácil ver que as duas expressões acima podem ser reunidas em uma única expressão para $\langle V \rangle$ da seguinte forma:

$$\langle V \rangle = 2V_0 - 8J_{troca} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$$

De fato, como os spins são iguais a $1/2$, chamando de θ o ângulo entre eles, teremos $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = S_1 S_2 \cos\theta = \cos\theta/4$. Conseqüentemente:

$$\langle V \rangle = 2V_0 - 2J_{troca} \cos\theta$$

Se os spins forem paralelos, $\theta = 0$, e teremos de volta a expressão $\langle V \rangle = 2V_0 - 2J_{troca}$. Mas, spins paralelos significam que a função de onda de spins é simétrica e, conseqüentemente, a espacial é antissimétrica. Se eles forem antiparalelos, $\theta = \pi$; a função de spin será antissimétrica e a espacial simétrica, e teremos $\langle V \rangle = 2V_0 + 2J_{troca}$.

Heisenberg foi quem primeiro notou que o termo $-2J_{troca} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ descreveria a ordem magnética nos materiais. Mesmo que os spins não sejam $1/2$, como no exemplo acima, não há problema; o importante é a *dependência funcional* de $\langle V \rangle$ em relação aos spins. Qualquer diferença no fator numérico multiplicativo pode ser incorporada no valor de J_{troca} . Este termo de energia que depende do produto escalar entre os spins é conhecido como *interação de Heisenberg*, e é a base dos modelos de ordem magnética nos materiais. Denotamos a interação de Heisenberg por \mathcal{H} :

$$\mathcal{H} = -2J_{troca} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$$

Se supusermos que $J_{troca} > 0$, veremos que a energia será mínima quando os spins forem paralelos, ou seja $\theta = 0$. Por outro lado, se $J_{troca} < 0$, a configuração de menor energia será aquela para a qual $\theta = \pi$, ou seja, spins antiparalelos.



A interação de troca ocasiona um aumento ou decréscimo na energia eletrostática do sistema, dependendo da direção relativa dos spins. O sistema buscará sempre o estado de menor energia, resultando em alguma forma de ordenamento magnético.

6.2 Tipos de Ordem Magnética

Considere agora não somente dois spins, mas uma rede cristalina com N íons, cada um com um spin. Vamos chamar \mathbf{S}_i o valor do spin do íon na posição i . Para simplificar, vamos supor que a nossa rede é linear. Cada spin interage com o seu vizinho próximo, de acordo com a interação de Heisenberg. Por exemplo, o spin na posição 5, denotado por \mathbf{S}_5 , interage com \mathbf{S}_4 e \mathbf{S}_6 :

$$-2J_{troca}\mathbf{S}_5 \cdot \mathbf{S}_4 - 2J_{troca}\mathbf{S}_5 \cdot \mathbf{S}_6 = -2J_{troca}(\mathbf{S}_5 \cdot \mathbf{S}_4 + \mathbf{S}_5 \cdot \mathbf{S}_6)$$

De uma maneira mais geral, um spin na posição i interagirá com aqueles nas posições $i + 1$ e $i - 1$. A energia de troca total será a soma de todos

os pares de spins próximos, ou seja:

$$\mathcal{H} = -2J_{troca} \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}$$

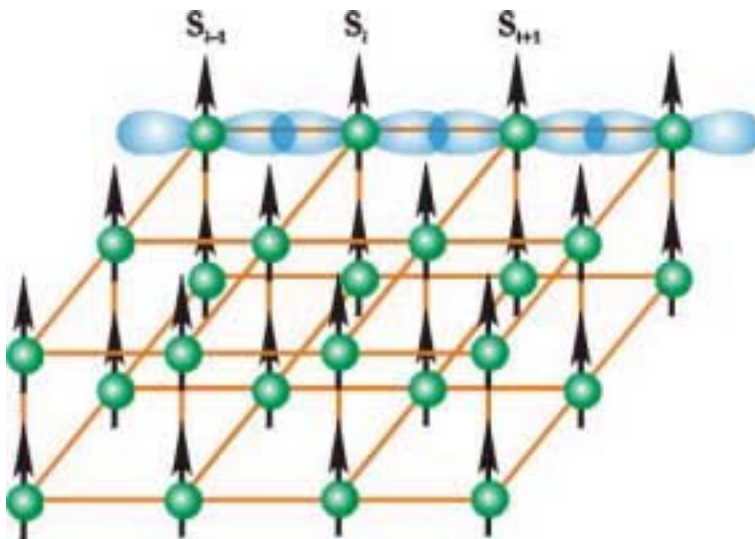
Como vimos acima, se J_{troca} for positiva, os spins se alinham paralelamente, pois desta forma a energia do conjunto será minimizada. Esse tipo de ordem magnética é chamada de *ferromagnetismo*, e é o que acontece, por exemplo com o ferro metálico, ou com o composto CrO_2 , entre vários exemplos. É também o que acontece com o gadolínio metálico.

Se J_{troca} for menor do que zero, a energia será mínima para uma configuração em que os spins se alinham antiparalelamente. Este tipo de ordem é chamada de *antiferromagnetismo*. Exemplos de materiais antiferromagnéticos são o MnO , o FeCl_2 , o NiO , entre outros.

Tanto no ferromagnetismo quanto no antiferromagnetismo, os spins possuem a mesma magnitude. É interessante ressaltar que no caso do antiferromagnetismo, devido ao fato de que os spins vizinhos apontam em direções antiparalelas alternadamente, a magnetização total será nula, embora haja ordem magnética. Este é um dos “casos especiais” mencionados na seção anterior em que $\mathbf{m}_i \neq 0$, mas $\mathbf{M} = 0$. É possível ocorrer também o caso em que na mesma rede existam íons com spins de magnitude diferentes, levando a situações mais complexas. Por exemplo, na magnetita, um óxido de ferro natural com fórmula química Fe_3O_4 , existem dois tipos de íons de ferro: os duplamente ionizados Fe^{2+} , e os triplamente ionizados Fe^{3+} . Os primeiros possuem $S = 2$, e os segundos $S = 5/2$. Os que possuem spin maior se alinham antiferromagneticamente, e os que possuem spin menor se alinham ferromag-

neticamente. Tudo dentro do mesmo cristal! Isso se deve basicamente às variações da energia de troca entre os íons na magnetita, e serve para exemplificar a riqueza do fenômeno do magnetismo. A magnetita é um exemplo do que chamamos de *ferrimagnetos*. Existem ainda vários outros exemplos de ordem magnética que não vamos mencionar aqui.

Resumindo: a interação de Heisenberg é a origem microscópica do magnetismo na matéria. Ela resulta de dois fatores: (i) a interação coulombiana entre os elétrons, e (ii) o princípio de exclusão. Nunca é demais enfatizar o fato pouco intuitivo que a ordem magnética na matéria resulta de uma interação de natureza elétrica. A Física sempre nos surpreende!



Em uma rede cristalina a interação de troca entre os átomos leva ao ordenamento magnético do material.

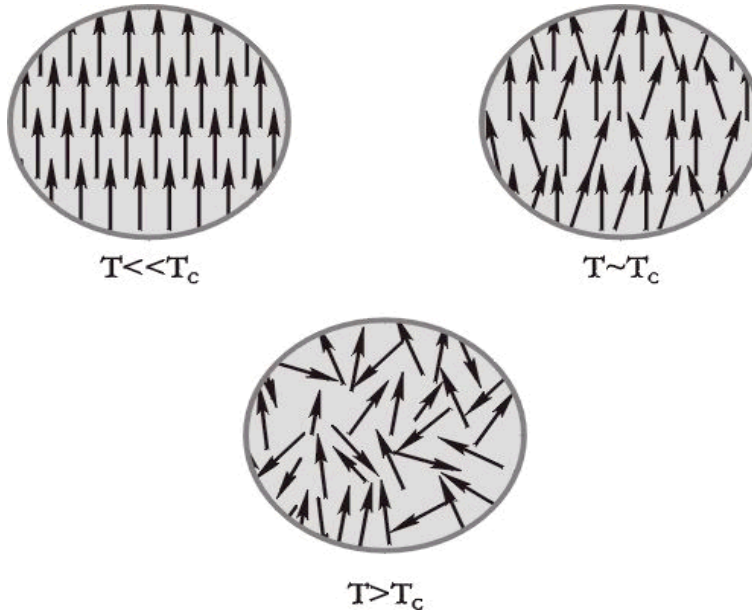
Porém, somente a interação de Heisenberg não explica porque alguns materiais se ordenam magneticamente e outros não; ela mera-

mente prevê a existência de ordem magnética. Aliás, qualquer material que possua ordem magnética, a perde se for aquecido a uma temperatura suficientemente alta. Para o ferro metálico, por exemplo, essa temperatura é da ordem de 1000 graus, e para o Gd metálico ela é da ordem de 300 graus Kelvin. A temperatura na qual um material perde a ordem magnética é uma característica intrínseca de cada material, e chamada de *temperatura crítica*, denotada por T_c . Temos então de um lado a interação de troca que tende a fazer com que o material se ordene magneticamente, e de outro o efeito da temperatura, ou *energia térmica* que tende a destruir a ordem magnética. É a competição entre essas duas formas de energia (magnética e térmica) que diz se o material será ordenado magneticamente ou não. A energia térmica associada a uma temperatura T é igual a $k_B T$, onde k_B é a constante de Boltzmann. Se a temperatura do material estiver acima da temperatura crítica, a energia térmica $k_B T$ será maior do que a energia de troca, e o material não estará ordenado magneticamente. Se o material for resfriado, quando T estiver se aproximando de T_c , começa a surgir ordem magnética. Quando $T = T_c$, a energia térmica se torna da mesma magnitude que a energia de troca, e o material se ordena magneticamente. Então, para que a ordem magnética se mantenha, é necessário que a temperatura do material seja tal que:

$$J_{troca} \geq k_B T$$

Se substituirmos $T = T_c$ nesta expressão, obtemos uma estimativa para J_{troca} . Por exemplo, para o Gd metálico,

$$J_{troca} \approx 300 \text{ K} \times 1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K} = 0,026 \text{ eV}$$



Qualquer material ordenado magneticamente, o deixa de ser a uma dada temperatura chamada de *temperatura crítica*, T_c . Acima desta temperatura os momentos atômicos se desordenam. A temperatura crítica é uma medida da intensidade da interação de troca.

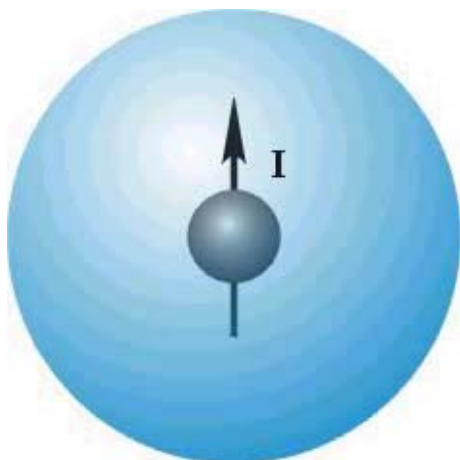
6.3 Magnetismo Nuclear

A maior parte dos núcleos dos átomos da tabela periódica possui spin diferente de zero. Assim como no caso atômico, o spin nuclear, que representaremos por \mathbf{I} , é o resultado da distribuição de prótons e nêutrons dentro do núcleo, nos orbitais quânticos nucleares. Ao spin do núcleo associa-se um *momento magnético nuclear*, que chamaremos \mathbf{m}_n :

$$\mathbf{m}_n = g_n \mathbf{I}$$

onde g_n é uma constante de proporcionalidade. Núcleos diferentes possuem spins diferentes. Por exemplo, o próton, que é o núcleo do átomo

de hidrogênio, possui spin $I = 1/2$. O isótopo ^{59}Co do cobalto possui $I = 7/2$, e o ^{157}Gd (gadolínio) possui $I = 3/2$. De fato, o spin nuclear \mathbf{I} é a grandeza equivalente ao momento angular total \mathbf{J} no caso atômico, e não ao spin propriamente dito, \mathbf{S} .

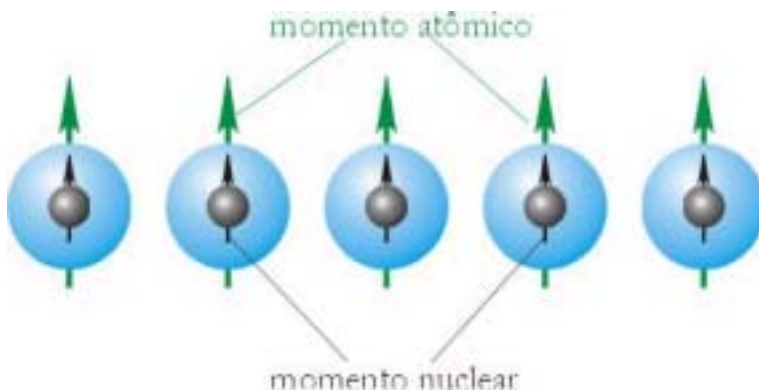


A maioria dos núcleos possui momento angular, e portanto momento magnético, que dá origem ao magnetismo nuclear.

Contudo, o magnetismo nuclear é muito mais fraco do que o magnetismo atômico⁴. Isso quer dizer que os momentos magnéticos dos núcleos contribuem pouco para a magnetização de um material paramagnético ou ferromagnético. Como vimos no capítulo três, momentos magnéticos tendem a se alinhar com campos magnéticos. Ao aplicarmos um campo magnético em um material qualquer, como a uma amostra de água, criamos uma *magnetização nuclear*, como efeito do

⁴Isto está fundamentalmente relacionado ao fato de a massa do elétron ser muito menor do que a massa do próton.

alinhamento dos momentos magnéticos nucleares com o campo. Obviamente, ao retirarmos o campo, os momentos voltam a apontar para direções aleatórias, e a magnetização desaparece. No caso dos materiais que possuem ordem magnética, como o Fe metálico, por exemplo, acontece algo mais interessante. Abaixo da temperatura crítica, os momentos magnéticos atômicos do Fe apontam para a mesma direção. Mas, cada momento magnético atômico por sua vez cria um campo magnético que, na posição do núcleo, é paralelo ao momento do átomo. Este campo magnético tende a alinhar os momentos nucleares ao longo da mesma direção. Então o que se observa nesses materiais é uma magnetização nuclear permanente causada pela ordem magnética dos momentos atômicos do material.



O magnetismo nuclear é muito mais fraco do que o atômico e, em condições normais, não se observa ordenamento magnético nuclear espontâneo. No entanto, nos materiais que apresentam ordem magnética, os momentos nucleares tendem a se alinhar com os momentos atômicos.

Um dos avanços mais notáveis da física experimental nos últimos cinquenta anos foi o desenvolvimento de técnicas experimentais que possibilitaram o estudo do magnetismo nuclear. Exatamente pelo fato de este ser muito pequeno, essas técnicas são de certa forma “especiais”, e se utilizam de um importante fenômeno que mencionamos no capítulo um: o fenômeno da ressonância. Relembrando, de uma maneira geral, a ressonância é um fenômeno de absorção de energia de modo seletivo. Para haver ressonância precisamos de dois ingredientes básicos: um sistema onde exista uma *freqüência natural* ou *modo normal de vibração* (veja capítulo um), e um agente externo que atue sobre o sistema nesta mesma freqüência. O exemplo usado no capítulo um foi o sistema massa-mola. A freqüência natural é neste caso dada por $f = (2\pi)^{-1}\sqrt{k/m}$, onde k é a constante elástica da mola, e m a massa do objeto a ela presa. Vimos ainda o caso da ressonância de cíclotron, onde a freqüência de ressonância é dada por qB/m . No sistema massa-mola, o agente externo pode ser uma pessoa, que faz a mola oscilar para cima e para baixo. Se a freqüência associada ao movimento da mão for igual à freqüência natural do sistema, este absorverá grande quantidade de energia (neste caso, energia mecânica do movimento da mão), e a amplitude do movimento será maior. No sistema carga-campo magnético, o agente externo pode ser um campo elétrico oscilante.

No caso que vamos tratar agora o sistema físico compreende os momentos magnéticos nucleares que entram em ressonância com um campo eletromagnético externo, mais especificamente, a parte magnética do campo. O fenômeno é chamado *ressonância magnética nuclear* ou RMN.

6.4 Ressonância Magnética Nuclear

Sabemos que momentos magnéticos interagem com campos magnéticos. Um núcleo com spin \mathbf{I} e momento magnético $\mathbf{m}_n = g_n \mathbf{I}$, na presença de um campo magnético \mathbf{B} terá uma energia magnética dada pelo produto escalar de \mathbf{m}_n com \mathbf{B} (veja capítulo três):

$$E = -\mathbf{m}_n \cdot \mathbf{B} = -g_n \mathbf{I} \cdot \mathbf{B}$$

Vamos imaginar que o campo magnético aponte na direção z , ou seja: $\mathbf{B} = B\mathbf{k}$. Nesse caso, a energia magnética do núcleo se torna:

$$E = -g_n B I_z$$

onde I_z é a componente z do spin nuclear. Mas, sabemos do capítulo três que componentes de momentos angulares, como I_z , só podem adquirir um conjunto discretos de valores, que no presente caso chamaremos⁵ de m . Os valores que m pode assumir são: $m = -I, -I + 1, \dots, I - 1, I$. Como conseqüência os níveis de energia magnética do momento magnético nuclear no campo magnético serão discretos (ou quantizados), e dados por:

$$E_m = -g_n B m$$

Estes são os valores possíveis de E (ou, como denominados no capítulo três, autovalores de energia). Para o próton, por exemplo, $I = 1/2$, e conseqüentemente $m = -1/2, +1/2$. Logo, só existirão dois valores possíveis de energia magnética para o próton:

⁵No capítulo três usamos m_s e m_l , respectivamente, para as componentes z do spin e do momento angular orbital.

$$E_{+1/2} = -\frac{1}{2}g_n B \text{ e } E_{-1/2} = +\frac{1}{2}g_n B$$

Para um núcleo como o do isótopo ^{155}Gd , que possui $I = 3/2$, teremos $m = -3/2, -1/2, +1/2, +3/2$, e portanto 4 níveis de energia possíveis:

$$E_{+3/2} = -\frac{3}{2}g_n B$$

$$E_{+1/2} = -\frac{1}{2}g_n B$$

$$E_{-1/2} = +\frac{1}{2}g_n B$$

$$E_{-3/2} = +\frac{3}{2}g_n B$$

E assim por diante. De um modo geral, um núcleo com spin I terá $2I + 1$ níveis de energia.

Embora até aqui não tenhamos explicitado, o fator de proporcionalidade g_n é uma característica de cada núcleo. Ele é proporcional à constante de Planck \hbar , e escrito mais comumente como:

$$g_n = \gamma_n \hbar$$

onde γ_n é chamado de *fator giromagnético nuclear*, uma espécie de identidade magnética do núcleo. Essa quantidade nos diz que núcleos diferentes, quando sujeitos ao mesmo campo magnético, terão valores diferentes de energia. No SI a unidade de γ_n é Hz/T (hertz por tesla), mas por razões práticas é normal expressarmos esta quantidade em MHz/kG (megahertz por kilogauss).

Podemos agora re-escrever os valores de E_m como⁶:

$$E_m = -\gamma_n \hbar B m$$

Considere como exemplo o núcleo do ^{157}Gd , para o qual $I = 3/2$ e $\gamma_n = 1,713 \text{ MHz/T}$. Em um campo $B = 10 \text{ T}$, os quatro níveis de energia magnética deste núcleo serão:

$$E_{-3/2} = +1,69 \times 10^{-9} \text{ eV}$$

$$E_{-1/2} = +0,56 \times 10^{-9} \text{ eV}$$

$$E_{+1/2} = -0,56 \times 10^{-9} \text{ eV}$$

$$E_{+3/2} = -1,69 \times 10^{-9} \text{ eV}$$

A conveniência de escrevermos a energia desta forma, proporcional à constante de Planck, se tornará aparente abaixo.

Vamos calcular a separação (em energia) entre dois níveis consecutivos de energia, ou seja $E_m - E_{m-1}$ (ou $E_{m+1} - E_m$):

$$E_m - E_{m-1} = -\gamma_n \hbar B m - \gamma_n \hbar B (m - 1) = \gamma_n \hbar B$$

Donde, dividindo por \hbar obtemos:

$$\frac{E_m - E_{m-1}}{\hbar} = \gamma_n B$$

⁶O interesse em escrevermos g_n desta forma, está no fato de que assim a constante de Planck, que é a unidade fundamental de momento angular, fica explicitada.

Mas, a quantidade do lado esquerdo possui dimensão de frequência angular (o numerador tem dimensão de joule, e o denominador de joule vezes segundo, dividido por 2π). Esta quantidade é especial para a RMN: ela é chamada de *freqüência de Larmor*, e representada por ω_L . Então:

$$\omega_L = \gamma_n B$$

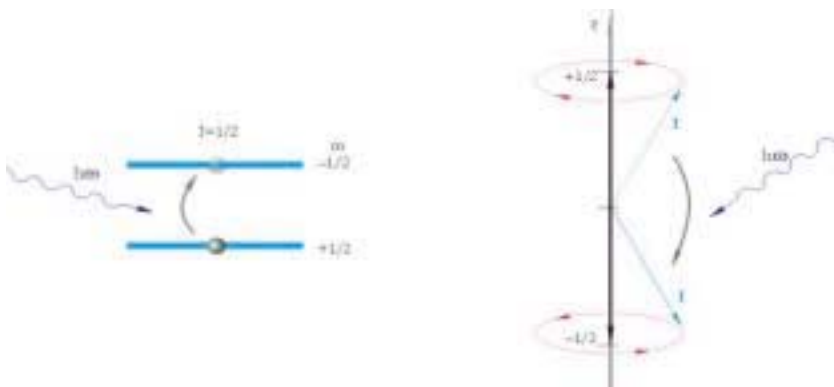
Substituindo γ_n para o ^{157}Gd em um campo de 10 T, obtemos $\omega_L = 17,13$ rd MHz, ou $f_L = \omega_L/2\pi = 2,73$ MHz.

A freqüência de Larmor é a freqüência natural do sistema de núcleos em um campo magnético, tanto quanto $\sqrt{k/m}$ é a freqüência natural do sistema massa-mola, ou qB/m do sistema carga-campo magnético.

No sistema massa-mola, a freqüência natural $\omega = \sqrt{k/m}$ tem uma interpretação física óbvia: é a freqüência de oscilação da massa. E no presente caso, qual o significado físico de ω_L ? Uma freqüência é algo que caracteriza o movimento periódico de um sistema físico. Embora a dedução de ω_L acima tenha sido feita via mecânica quântica, existe uma imagem clássica simples que nos ajuda a entender o significado de ω_L . Um momento magnético na presença de um campo magnético adquire um movimento de precessão em torno da direção do campo. A freqüência de Larmor é a freqüência desta precessão. A situação é semelhante à de um giroscópio (pião): quando em movimento de rotação possui um “spin” que precessiona em torno da direção do campo gravitacional.

Suponha agora que tenhamos um único spin $I = 1/2$ em um campo magnético. Como vimos acima, haverá dois níveis de energia, $E_{+1/2}$

e $E_{-1/2}$, sendo que o primeiro é mais baixo que o segundo. Suponha que o spin se encontre no nível $E_{+1/2}$. A distância, em energia, do nível acima é igual a $\hbar\omega_L$. Se irradiarmos esse sistema com fótons cuja energia por partícula, $\hbar\omega$, seja exatamente igual à separação entre os níveis, o núcleo pode absorver um fóton e mudar de nível de energia. Isso equivale à componente z do spin passar do estado $m = +1/2$ para o estado $m = -1/2$, ou seja “virar de cabeça para baixo” ⁷. Este é o fenômeno da ressonância magnética nuclear. O núcleo absorve energia ressonantemente da onda eletromagnética. Se a frequência da onda for diferente de ω_L não haverá absorção.



Um spin $I = 1/2$ em um campo magnético apresenta dois níveis de energia. Ao irradiarmos os sistema com fótons com energia $\hbar\omega = \Delta E/h$, onde ΔE é a distância em energia entre os dois níveis, haverá absorção de fótons. Este é o fenômeno da ressonância magnética nuclear.

⁷Atenção: é preciso tomar cuidado com certas imagens excessivamente clássicas como a que estou usando agora. Um médico formado, certa vez me disse - com aquela segurança que caracteriza os médicos - que na RMN o *átomo* virava de cabeça para baixo! Felizmente ele entendia mais de doença do que de RMN! Embora representemos a imagem do spin por uma seta, essa quantidade não é exatamente como uma agulha no nosso espaço tridimensional; esta “virada de cabeça para baixo” a que nos referimos se dá no *espaço dos spins*!

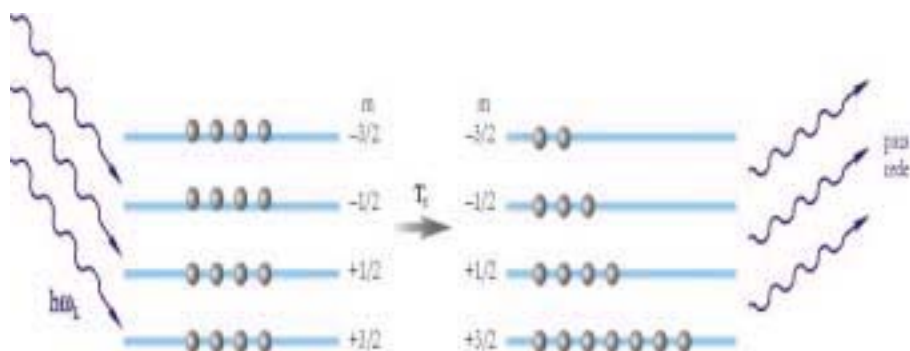
E o que ocorre se não tivermos apenas 1 spin, mas uma amostra de água, com cerca de 10^{23} spins por cm^3 ? Esta é uma pergunta importante, pois experimentos em laboratórios lidam com quantidades de núcleos desta ordem. Em um copo com água, cada núcleo de hidrogênio terá spin $I = 1/2$. Por sua vez, o isótopo de oxigênio ^{16}O , que é 99,76% abundante, e portanto de longe o mais presente na água, possui $I = 0$. Conseqüentemente, este isótopo não contribui para a magnetização nuclear e, para fins de RMN, não é importante. Como todos os núcleos de H possuem o mesmo spin $1/2$, ainda haverá somente dois níveis de energia acessíveis para cada um deles. Na Natureza, níveis mais baixos de energia têm preferência para ocupação. Então, haverá mais spins no nível $E_{+1/2}$ do que no nível $E_{-1/2}$. Quando o copo com água (no campo magnético) for irradiado por uma onda eletromagnética na frequência de Larmor, os spins que estão em baixo “pulam” para cima⁸. Mas, o fenômeno é tal que a onda também pode fazer os spins de cima “pularem” para baixo. Isso ocorre porque do ponto de vista quântico, a probabilidade de uma transição de baixo para cima é igual a uma de cima para baixo. Cada vez que um spin pula de cima para baixo, ele emite um fóton, ao passo que cada vez que um spin pula de baixo para cima ele absorve um fóton. Como inicialmente havia mais spins em baixo do que em cima, haverá mais absorção do que emissão de fótons.

Ao irradiarmos continuamente o sistema, haverá uma tendência a igualarmos o número de spins no nível superior com o número de spins no nível inferior. No limite em que os dois níveis possuem o mesmo

⁸Atenção aqui. Trata-se de um “pulo” no “espaço das energias”, cujo significado é um aumento ou um decréscimo de um quantum de energia.

número de spins, a magnetização nuclear será zero, pois os spins apontam para direções opostas. Se desligarmos o campo eletromagnético, o sistema re-adquire o equilíbrio, com a maioria dos spins retornando para o nível de energia mais baixo, e portanto recuperando a magnetização nuclear. O tempo entre o momento em que desligamos o campo e a recuperação do equilíbrio é um importante parâmetro na RMN: ele é chamado de *tempo de relaxação spin-rede*, e representado por T_1 . É simples entender a razão para esse nome. Quando desligamos a onda eletromagnética, a maioria dos spins que estão no nível de cima decaem para o nível de baixo, emitindo fótons. Estes fótons são quantuns da energia que está sendo liberada pelos núcleos, e eles devem ir para “algum lugar”. Dizemos que eles são absorvidos pela rede (aqui empregamos a palavra “rede” como uma denominação genérica para o meio em torno dos núcleos). Se o sistema de núcleos não estivesse em contato com a rede não haveria como liberar energia e os spins continuariam no nível superior de energia. A situação é semelhante ao caso de um copo de isopor contendo água fervendo dentro de uma vasilha com grande quantidade de gelo. O isopor isola *termicamente* a água fervendo do gelo que está do lado de fora. Resultado: a água não esfria, porque está isolada da “rede” (nesse caso representada pelo gelo). Por outro lado, se colocarmos a água em um copo de alumínio, ela se resfriará rapidamente, pois o alumínio faz contato térmico entre a água fervendo e o gelo. No caso dos núcleos ocorre algo semelhante: quando o nível de cima está mais populoso, o sistema está “quente”. Quando desligamos a radiação eletromagnética, as interações entre os núcleos e a rede estabelecem um “contato térmico” e fazem com que

eles decaíam, “esfriando” o sistema nuclear.



Ao ser irradiado continuamente com fótons na frequência de ressonância, um sistema de spins nucleares tende a igualar as populações dos níveis de energia. Quando a onda eletromagnética é desligada, os spins retornam ao equilíbrio térmico em um tempo característico T_1 , chamado “tempo de relaxação spin-rede”.

Existe ainda um outro parâmetro temporal importante em RMN, chamado de *tempo de relaxação spin-spin*, representado por T_2 . Este é um pouco mais sutil, mas não chega a ser difícil de entender. Este tempo está ligado às interações dos spins entre si. Ele se refere ao tempo que as interações entre os spins levam para distribuir internamente a energia absorvida da onda. T_2 é, em geral, menor do que T_1 porque, de certa forma, as interações entre dois spins são mais eficientes em distribuir a energia entre eles do que entre cada spin separado e a rede. Vamos recorrer a outra analogia: água em uma panela de metal colocada no fogo. Suponha que uma panela grande de metal esteja cheia de água. Colocando a panela no fogo, o metal aquecerá mais

rapidamente do que a água que está dentro da panela. Isso porque o contato térmico entre as partes de metal é tal que o calor se distribui mais rapidamente na panela do que entre esta e a água. Imagine a panela como o sistema de spins nucleares, e a água dentro dela como a rede. Ao colocarmos a panela no fogo, o calor se distribui no metal com um tempo T_2 , e depois para a água com um tempo T_1 .

Esses tempos possuem também uma interpretação em termos do movimento da magnetização nuclear em torno do campo aplicado. É importante entendermos essas imagens, pois elas nos serão úteis para entender um fenômeno importantíssimo que será discutido na seção 6.6: os *ecos de spin*.

6.5 O Sistema Girante

A RMN é um dos mais impressionantes exemplos de como a física básica pode se converter em tecnologias que revolucionam outras áreas do conhecimento e da técnica. Tendo surgido na década de 40, como poderiam os cientistas da época imaginar que o novo fenômeno seria um dia utilizado para gerar imagens do interior do corpo humano em pleno funcionamento! Hoje os chamados tomógrafos de RMN se espalharam pelas clínicas e hospitais de todo o mundo, e são um poderoso auxiliar para o diagnóstico de tumores, hematomas, etc. Para entendermos como funciona a “mágica”, é preciso entender antes uma variação do que foi exposto na seção anterior, a RMN *pulsada*.

Vimos que o fenômeno da RMN se dá quando uma onda eletromagnética, com frequência igual à sua frequência de Larmor, incide

sobre um sistema de momentos magnéticos nucleares em um campo magnético estático. Embora não tenhamos entrado em detalhes, mais precisamente é a parte *magnética* da onda que causa o fenômeno. Sabemos que uma onda eletromagnética possui um campo elétrico e um campo magnético que oscilam no espaço e no tempo (veja capítulo um). Para efeitos da RMN, podemos desprezar o campo elétrico, e considerarmos o campo magnético espacialmente uniforme. Matematicamente representamos tal campo como:

$$\mathbf{B}_1(t) = B_1[\cos(\omega t)\mathbf{i} + \sin(\omega t)\mathbf{j}]$$

onde usamos a notação B_1 para diferenciar do campo estático B que, vamos supor, atua ao longo da direção z . Note que este campo possui uma forma especial: o seu movimento pode ser visualizado como o de um vetor girando com velocidade angular ω no plano xy . Embora essa forma de escrever o campo oscilante não seja a única, ela é a mais conveniente do ponto de vista matemático, como ficará claro logo abaixo. Além disso, campos oscilantes com esta dependência temporal podem ser facilmente produzidos experimentalmente. Repetindo: temos dois campos magnéticos: um estático, de magnitude B ao longo do eixo z , e outro oscilante, de magnitude B_1 , que gira no plano xy . B serve para estabelecer uma frequência natural no sistema, enquanto que B_1 serve para levar o sistema à ressonância. Normalmente, o campo B_1 é muito menor do que o campo B . O campo magnético total atuando sobre os momentos magnéticos nucleares será simplesmente a soma dos dois campos:

$$\mathbf{B}_{total} = B\mathbf{k} + B_1[\cos(\omega t)\mathbf{i} + \sin(\omega t)\mathbf{j}]$$

Queremos descrever o movimento da magnetização nuclear sujeita ao campo magnético acima. Sabemos que momentos magnéticos giram em torno da direção de campos magnéticos. Mas, no caso acima fica difícil visualizarmos tal movimento, pois o campo total também está girando. Felizmente existe uma saída elegante (e fantástica!) para o problema.

Obviamente o campo magnético acima é aquele visto por um observador em um referencial inercial, ou seja, em um referencial em que os vetores unitários \mathbf{i} , \mathbf{j} e \mathbf{k} estão parados em relação a ele. Mas, na medida em que o termo dependente do tempo representa um vetor girando no plano xy , podemos perfeitamente imaginar um novo sistema de referência que gire com este vetor. Um observador neste novo sistema de referência verá o campo parado no tempo. Vamos chamar de \mathbf{i}' , \mathbf{j}' e \mathbf{k}' os vetores unitários no novo sistema (daqui por diante vamos nos referir ao sistema inercial como *sistema de laboratório* e ao outro como *sistema girante*), sendo que a rotação se dá em torno de \mathbf{k} , que portanto coincide com \mathbf{k}' . Podemos imaginar que o campo \mathbf{B}_1 esteja *fixo* sobre o eixo x' no sistema girante. É fácil ver que em termos de \mathbf{i} e \mathbf{j} o versor \mathbf{i}' pode ser escrito como⁹:

$$\mathbf{i}' = \cos(\omega t)\mathbf{i} + \sin(\omega t)\mathbf{j}$$

ou seja, no sistema girante o campo total se torna:

$$\mathbf{B}_{total} = B\mathbf{k}' + B_1\mathbf{i}'$$

e portanto independente do tempo.

⁹Imagine \mathbf{i}' como um vetor no plano formado por \mathbf{i} e \mathbf{j} , fazendo um ângulo ωt com o eixo \mathbf{i} .

Imaginar um sistema girante pode parecer um pouco abstrato à primeira vista, mas não é difícil. Pegue uma pedra amarrada em um barbante e gire-a sobre a sua cabeça. Você pode fazer isso de duas maneiras: ou você gira somente o braço que impulsiona a pedra, mantendo o resto do corpo parado, ou você também gira junto com ela. No primeiro caso você verá a pedra girar, ou seja, estará no referencial de “laboratório”. No segundo você a verá parada, ou seja, estará no sistema “girante”. É claro que para ver a pedra parada, é preciso girar com ela! Felizmente, no caso da RMN não precisamos girar milhões de vezes por segundo junto com os núcleos para estar no referencial girante. O fenômeno é detectado por equipamentos que já fazem este truque eletronicamente.

Mas a história não termina por aí. Se B_1 for muito pequeno comparado a B , um observador no laboratório verá a magnetização nuclear girar com uma velocidade angular aproximadamente igual a $\omega_L = \gamma_n B$ em torno do eixo z . Por outro lado, um observador no sistema girante, que roda com uma velocidade ω no *mesmo sentido* de rotação dos núcleos, não vê a mesma frequência de precessão ω_L , mas sim a diferença¹⁰ $\omega_L - \omega$. Isso é intuitivo, pois se o observador no sistema girante rodar exatamente com ω_L , ele verá a magnetização parada, como no exemplo da pedra. Por outro lado, se para ele a frequência de precessão é diferente daquela vista pelo observador parado, também o será o campo magnético, pois o movimento da magnetização se dá exatamente devido à ação do campo! De fato, para o observador no sistema

¹⁰A situação é inteiramente análoga ao problema do movimento relativo discutido no capítulo um. A diferença é que aqui adicionamos frequências angulares, e não velocidades.

girante, tudo se passa como se o campo magnético atuando na direção z fosse dado, não somente por B , mas por

$$B - \frac{\omega}{\gamma_n}$$

Note que se multiplicarmos essa expressão por γ_n obtemos a frequência correta $\omega_L - \omega$ vista pelo observador no sistema girante. Chamamos de *campo magnético efetivo* o campo magnético total visto pelo observador no sistema girante:

$$\mathbf{B}_{ef} = B_1 \mathbf{i}' + \left(B - \frac{\omega}{\gamma_n} \right) \mathbf{k}'$$

Às vezes, a quantidade ω/γ_n é chamada de *campo magnético fictício*, por não se tratar de um campo magnético real, mas apenas de um efeito da rotação do sistema de coordenadas.

Algo notável agora acontece. Suponha que o campo oscilante tenha uma frequência exatamente igual a $\omega_L = \gamma_n B$, ou seja, esteja em ressonância com o sistema. O campo magnético na direção z' neste caso se torna:

$$B - \frac{\omega_L}{\gamma_n} = B - \frac{\gamma_n B}{\gamma_n} = B - B = 0$$

Ou seja, para o observador no sistema girante, na ressonância, o campo na direção z' se anula! Este é o efeito da ressonância. A mágica disso está exatamente no fato de que supomos de partida que $B \gg B_1$, e no entanto, por um efeito de ressonância, B desaparece para o observador no sistema girante que passa a ver somente B_1 ! Estamos agora com as “ferramentas” para entendermos a RMN pulsada e os ecos de spin.

6.6 Ecos de Spin

Toda a discussão se passa no sistema girante. Inicialmente temos um campo B estático ao longo de z' . Repentinamente, um campo B_1 é aplicado na direção x' , com frequência $\omega = \omega_L$, fazendo “desaparecer” o campo B para o observador no sistema girante. A magnetização nuclear, que inicialmente precessionava em torno da direção z' , passará a girar em torno de B_1 com uma frequência angular $\omega_1 = \gamma_n B_1$. Esta frequência é para o observador no sistema girante o equivalente à frequência de Larmor para o observador no laboratório, com a diferença de que como $B_1 \ll B$, teremos $\omega_1 \ll \omega_L$. Após um intervalo de tempo τ , a magnetização terá girado de um ângulo θ igual a:

$$\theta = \omega_1 \tau = \gamma_n B_1 \tau$$

B_1 e τ são parâmetros que podem ser controlados, ou seja, aumentados ou diminuídos arbitrariamente pelo experimentador. Podemos pensar então que, para B_1 fixo, o ângulo θ acima pode ser controlado simplesmente variando-se a duração τ . Poderíamos, por exemplo, controlar τ de modo que $\theta = \pi/2$, ou π , ou imaginar uma seqüência, em que primeiro B_1 é aplicado por certo tempo, de modo que $\theta = \pi/2$, desligado por um intervalo $\Delta\tau$, e ligado novamente de modo que $\theta = \pi$. Qualquer seqüência é possível. Com isso podemos controlar a posição da magnetização nuclear. Esta maneira de aplicar o campo oscilante em intervalos fixos de duração, ou, como no jargão da RMN, sob a forma de *pulsos*, caracteriza a RMN pulsada.

A RMN pulsada dá origem a um fenômeno peculiar: os ecos de spin. Ecos de spin estão relacionados às componentes x e y da magnetização

nuclear no sistema girante (vamos omitir a ‘linha’ pois daqui por diante só estaremos falando de sistema girante). É muito fácil entender o fenômeno, mas antes é preciso introduzir mais uns ingredientes.

Para que haja ecos de spin, é necessário que haja *inogeneidade* no campo estático B , ou seja, é preciso que o campo varie espacialmente. Esta inogeneidade de B , que denotaremos por ΔB , se refletirá na frequência de Larmor dos spins, que também passará a ter uma distribuição de valores $\Delta\omega_L = \gamma_n\Delta B$. Isso quer dizer que momentos magnéticos nucleares em posições diferentes dentro do material precessionarão com velocidades angulares diferentes. Como consequência, um campo magnético oscilante, aplicado sob a forma de um pulso, normalmente não agirá de forma ressonante sobre todos os spins, mas somente sobre uma parte deles. A esta fração dos spins que “sente” a atuação do pulso, dá-se o nome de *pacote de spins*¹¹.

Vamos então imaginar que inicialmente a magnetização aponta para a direção z . As frequências de Larmor estão distribuídas na faixa $\Delta\omega_L = \gamma_n\Delta B$. Um pulso magnético é aplicado ao longo de x faz girar todos os momentos que precessionam dentro de um determinado pacote de spins. Vamos supor que trata-se de um pulso $\pi/2$, e que toda a magnetização seja girada, o que será verdade sempre que $\Delta\omega_L$ não for grande. Então, a magnetização que apontava ao longo de z , passa a apontar ao longo de y . O pulso é desligado; o que acontece com a

¹¹Se a inogeneidade ΔB não for muito grande, é possível que todos os spins sejam excitados pelo pulso. Neste caso o pacote de spins seria igual a totalidade dos spins. Se, contudo, a inogeneidade for muito grande, para que todos os spins sejam excitados, será preciso variar a frequência do campo oscilante em torno de ω_L .

magnetização? Na ausência do pulso os momentos magnéticos precessionarão em torno do campo estático B . Mas como este é inhomogêneo, alguns momentos precessionarão mais rápido do que outros, causando uma dispersão da magnetização no plano xy . Após um intervalo de tempo $\Delta\tau$, um outro pulso é aplicado, de modo a girar a magnetização de um ângulo π em torno de x . Um “milagre” então acontece: o sentido de rotação dos momentos dispersos é invertido, e a magnetização no plano xy é refocalizada! Esta refocalização é o que se chama de eco de spins. Nos referimos a esta seqüência particular de pulsos como $\pi/2 - \Delta\tau - \pi$.

Vamos agora interpretar os tempos de relaxação T_1 e T_2 em termos do movimento da magnetização nuclear. O tempo de relaxação T_1 corresponde ao tempo para a recuperação da magnetização de equilíbrio após a remoção dos pulsos. O tempo T_2 corresponde ao tempo gasto para a magnetização no plano xy desaparecer. Essa perda da magnetização no plano ocorre devido à interação entre os spins, causando sua dispersão total. Verifica-se que T_2 é sempre menor ou igual a T_1 .

PAINEL XII
RMN E COMPUTAÇÃO QUÂNTICA

No início da década de 80, Richard Feynman, um dos físicos americanos mais importantes do século XX, afirmou que seria impossível simular sistemas quânticos de forma completa, utilizando ferramentas clássicas. Como as bases de funcionamento de um computador comum são clássicas, isto significaria que sistemas quânticos não poderiam ser simulados em um computador, a menos que este também funcionasse com bases quânticas, ou seja, fosse um *computador quântico*. As observações de Feynman resultaram numa busca de como deveria funcionar um computador quântico. O resultado foi surpreendente: um computador quântico teria uma capacidade computacional que transformaria os mais poderosos computadores da atualidade em meras régua de cálculo.

Como sabemos, computadores clássicos operam com sinais elétricos sob a forma de pulsos que representam dois estados lógicos: 0 e 1. Estes dois dígitos são a base do sistema numérico binário. Todas as maravilhosas tarefas executadas pelos computadores atuais podem, em última instância, ser traduzidas como uma imensa seqüência de “zeros” e “uns”. O “estado lógico” de um computador clássico poderia parecer algo como: 10010111000111110000111110000110... Uma característica fundamental desta tecnologia é o fato de dois estados lógicos serem mutuamente excludentes: em uma dada posição da seqüência, ou aparece o dígito “1” ou o dígito “0”, mas nunca os dois ao mesmo tempo. No mundo quântico é diferente.

Suponha que tenhamos duas partículas com spin $1/2$ em um campo magnético. Cada uma delas pode ter projeção $\pm 1/2$ ao longo da direção do campo. Existem então 4 configurações possíveis para o spin do sistema: $\uparrow\uparrow$, $\uparrow\downarrow$, $\downarrow\uparrow$ e $\downarrow\downarrow$. Cada uma dessas configurações é representada por uma autofunção, que podemos escrever como: $\phi_{\uparrow\uparrow}$, $\phi_{\uparrow\downarrow}$, $\phi_{\downarrow\uparrow}$ e $\phi_{\downarrow\downarrow}$.

Podemos interpretar o estado quântico “spin para baixo” como um estado lógico, por exemplo, “0”. Analogamente, podemos interpretar o estado quântico “spin para cima” como “1”. Com isto, os estados de spin acima seriam representados, respectivamente, por 11, 10, 01 e 00, e as autofunções correspondentes ϕ_{11} ,

ϕ_{10} , ϕ_{01} e ϕ_{00} . Assim como a unidade de informação clássica é o “bit” (do inglês *binary digit*), a unidade de informação quântica é o “qubit” (*quantum binary digit*).

Como vimos no capítulo 3, estados quânticos são representados por superposições de autoestados. Podemos então pensar no seguinte estado para o sistema de dois spins:

$$\psi = a_{11}\phi_{11} + a_{10}\phi_{10} + a_{01}\phi_{01} + a_{00}\phi_{00}$$

onde $|a_{11}|^2$ é a probabilidade de encontrarmos o estado ϕ_{11} em uma medida, analogamente para os outros coeficientes.

É precisamente a possibilidade de superpor estados que torna a computação quântica imensamente superior à clássica. Em termos lógicos, o estado acima representa a possibilidade de operarmos com os quatro estados 11, 10, 01 e 00 simultaneamente, o que é impossível classicamente. Se tivéssemos n spins, ao invés de 2, teríamos 2^n estados, ao invés de 4. Um computador quântico operaria simultaneamente com todos eles. Em outras palavras, todos os estados lógicos de um computador quântico poderiam ser acessados simultaneamente!

Operar com estados em um computador quântico significa manipular os spins. É aqui que entra a RMN. Em tese, qualquer sistema quântico com níveis discretos de energia poderia ser utilizado como computador quântico, mas até o momento somente a RMN foi capaz de demonstrar a realização da idéia na prática. Vários algoritmos quânticos já foram realizados experimentalmente através da RMN aplicada em moléculas com dois e três spins. Apesar da simplicidade desses “computadores rudimentares”, e das discussões sobre a utilização prática de computadores quânticos, há muito otimismo quanto ao futuro da computação quântica. Um dia você vai ver um computador quântico na prateleira de uma loja!

6.7 Imagens do Corpo Humano; uso Médico da RMN

A amplitude do eco de spins depende do número de momentos magnéticos no pacote de spins que, por sua vez, depende da inomogeneidade de B . Quanto maior for ΔB , menor será o número de momentos magnéticos no pacote de spins, e menor a amplitude do eco. Também é verdade que a amplitude do eco depende do número *total* de momentos magnéticos no material. Ou seja, quanto maior a concentração de spins nucleares, maior será o eco. Poderíamos, por exemplo, somente olhando as amplitudes dos ecos de prótons da água contida em 2 frascos diferentes, dizer qual deles tem mais água. Suponha que ao invés de 2 frascos, tenhamos um objeto com diferentes concentrações de água dentro dele. Se pudéssemos controlar a inomogeneidade do campo ΔB dentro do material poderíamos, através da análise das amplitudes dos ecos, dizer que região tem mais água. Ou seja, podemos “fotografar” a distribuição de líquidos dentro do objeto. Imagine agora que tal objeto seja substituído por uma pessoa, ou parte dela, como a cabeça ou a perna. Poderíamos, a partir da análise das amplitudes dos ecos, determinar as concentrações de líquidos dentro do meio, e a partir daí construir uma *imagem* interna daquela parte do corpo. Este é o princípio da tomografia por RMN!

Embora entre a detecção do eco de spins e a exibição de uma imagem interna do objeto no qual ele foi gerado haja muito trabalho matemático, o princípio físico que possibilita a construção dessas imagens é simples, e vale a pena ser discutido com mais detalhes. O

“truque” está no controle da inhomogeneidade do campo magnético estático ΔB . Campos magnéticos podem ser produzidos de modo a apresentarem variação espacial ao longo de uma direção no espaço. Por exemplo, poderíamos imaginar um campo cujo valor varie ao longo de um eixo x da seguinte forma: em $x = 0$ o valor do campo é de 5000 gauss (1 gauss = 0,0001 tesla), em $x = 50$ cm B seria 4000 gauss, e em $x = 100$ seria de 3000 gauss. Ou seja, o campo diminui de 1000 gauss a cada meio metro. Dizemos que existe um *gradiente de campo* ao longo de x . Representemos o gradiente pela letra G . Então:

$$G = -\frac{1000 \text{ gauss}}{50 \text{ cm}} = -20 \frac{\text{gauss}}{\text{cm}}$$

O sinal negativo indica que o campo diminui quando x aumenta.

Com isso, o valor do campo magnético em qualquer ponto ao longo de x pode ser escrito como:

$$B = B_0 - xG$$

onde B_0 é o valor de B em $x = 0$ (no exemplo acima 5000 gauss). A inhomogeneidade referida acima pode ser identificada como a diferença $B - B_0 = -xG$. Com essa expressão podemos calcular o valor do campo em qualquer ponto do eixo x . Por exemplo, em $x = 6,5$ cm teremos, utilizando os valores do exemplo acima:

$$B = 5000 - 6,5 \times 20 = 4870 \text{ gauss}$$

Podemos a partir daí calcular a frequência de Larmor em qualquer posição. Como B depende de x , ω_L também dependerá:

$$\omega_L(x) = \gamma B(x) = \gamma B_0 - \gamma x G$$

Suponha, por exemplo, que um núcleo hipotético tenha $\gamma = 2 \times 10^4$ Hz/gauss. Em $x = 0$ a frequência de ressonância desse núcleo seria:

$$\omega_L(x = 0) = 2 \times 10^4 \times 5000 = 10^8 \text{ Hz} = 100 \text{ MHz}$$

Se o mesmo núcleo estivesse em $x = 6,5$ cm a sua frequência de ressonância seria:

$$\omega_L(x = 6,5) = 2 \times 10^4 \times 4870 = 97,4 \text{ MHz}$$

Esta correspondência entre a frequência de ressonância e a posição do núcleo dentro do material é o que permite a construção das imagens. Note que se não houvesse gradiente de campo, ou seja, se $G = 0$, todos os núcleos da mesma espécie responderiam com a mesma frequência. Tendo em conta que a amplitude do sinal de RMN depende da concentração dos núcleos que estão ressoando, pode-se transformar a informação frequência vs. posição em *concentração de material* vs. posição. A partir daí algoritmos de computador para tratamento de imagens entram em ação e a imagem final é obtida.

Mas, como um médico pode chegar ao diagnóstico de uma doença baseado nas imagens? Neste ponto os tempos de relaxação T_1 e T_2 desempenham um papel fundamental. De fato, embora imagens possam ser contruídas apenas a partir da informação sobre as diferenças de concentrações de prótons (hidrogênio) nos tecidos, o quadro obtido dessa forma não é completamente livre de ambiguidades. A razão é que

tecidos saudáveis podem apresentar concentrações de prótons próximas a de tecidos não saudáveis. Por outro lado, tecidos saudáveis apresentam tempos de relaxação diferentes dos não saudáveis. Não é difícil imaginarmos a razão para isto se entendermos que tecidos saudáveis e não-saudáveis possuem composições químicas diferentes; na medida em que os tempos de relaxação estão relacionados às trocas de energia entre os spins dos núcleos ressonantes e as suas vizinhanças, eles serão sensíveis ao ambiente químico onde o núcleo se encontra. Faz-se então uma espécie de ponderação da amplitude do sinal de RMN com os tempos de relaxação T_1 e T_2 . Vamos discutir este ponto com um pouco mais de detalhes.

Normalmente um eco de spins é composto por uma superposição de sinais relativos a spins que relaxam rápido e outros que relaxam mais lentamente. A amplitude do eco depende tanto de T_1 quanto de T_2 . Se uma seqüência de dois pulsos for aplicada muito rapidamente, o eco será formado basicamente pelos spins dos núcleos que relaxam rápido (T_1 curto). Se, por outro lado, esperarmos um tempo suficientemente longo para repetir a seqüência de pulsos, os núcleos que relaxam rápido já terão alcançado o equilíbrio, e o eco será formado por aqueles que relaxam mais lentamente (T_1 longo). O mesmo ocorre com T_2 : em uma seqüência de dois pulsos, se aproximarmos os pulsos no tempo, o eco será formado basicamente por spins que possuem T_2 curto, ao passo que se separarmos os pulsos no tempo, só contribuirão aqueles spins que possuem T_2 longo. Associe agora T_1 e T_2 curtos ou longos a tecidos saudáveis ou não, e você tem uma maneira de distinguir tecidos dentro do corpo!

Após a detecção dos sinais de RMN, e a devida ponderação pelos tempos de relaxação, as imagens são construídas. As amplitudes dos ecos estão associadas ao brilho na imagem. Por exemplo, regiões mais claras representam sinais com maior intensidade, e mais escuras de menor intensidade. É preciso manter em mente que o brilho de uma determinada região em uma imagem depende do tipo de medida realizada (e de fato do operador do tomógrafo!). Conseqüentemente a mesma região pode aparecer mais clara ou mais escura, dependendo se o sinal de RMN que a representa foi ponderado por T_1 ou T_2 , ou ainda da seqüência de pulsos utilizada. Por exemplo, uma região escura em uma imagem ponderada por T_1 pode representar a presença de um tumor, uma inflamação ou edema. Regiões claras na mesma imagem podem representar gordura, baixo fluxo sanguíneo, etc. Ossos, ligamentos, cartilagem, etc., apresentam baixa intensidade em sinais ponderados tanto por T_1 quanto por T_2 . Tumores, inflamações e edemas, em geral, apresentam baixa intensidade em sinais ponderados por T_1 , e alta intensidade em sinais ponderados por T_2 . Qualquer que seja a situação, várias medidas serão normalmente necessárias a fim de que se chegue a um diagnóstico seguro.

6.8 A Fauna Quântica: Fótons, Fônons, Mágons, Plasmons, e outros ‘ons’

No próximo capítulo falaremos um pouco mais desta parceria Física-Medicina. No momento vamos deixar as doenças de lado, e retornar aos fenômenos básicos da Natureza.

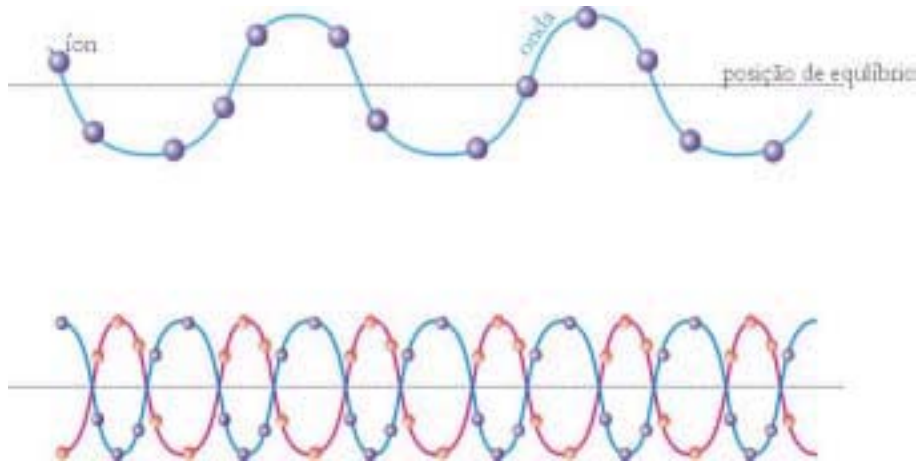
Imagine um sólido cristalino, magnético e metálico, como o Fe ou o Gd. Em cada ponto da rede existe um íon com um momento magnético que aponta para uma direção fixa. Cada íon está ligado ao seu vizinho e, “passeando” entre eles está o gás de elétrons. Como vimos no capítulo anterior, estes elétrons ocupam estados em uma banda de condução, e suas massas são diferentes daquela do elétron livre; são massas efetivas, m^* , que refletem as interações do elétron com a rede cristalina. Às vezes nos referimos a essas partículas com massas renormalizadas como *quase-partículas*. Ou seja, uma quase-partícula é uma partícula “revestida” de uma interação.

Se a temperatura do sólido fosse zero, cada íon da rede estaria praticamente parado, assim como cada momento magnético estaria fixo, todos apontando para a mesma direção. Mas, a uma temperatura finita e diferente de zero, a agitação térmica faz a rede vibrar. Se a temperatura não for muito alta, as vibrações ocorrerão sob a forma de ondas que se propagam pelo sólido. Por exemplo, imagine os íons como se fossem bolas ligadas entre si por molas. As molas representam as ligações químicas entre eles. Fazendo uma das bolas vibrar, o movimento será transmitido a todas as outras, que também passarão a vibrar, propagando uma *onda elástica* pelo sólido. Analogamente às ondas eletromagnéticas que possuem como contrapartida quântica o fóton, ondas elásticas dentro de um sólido possuem um quantum associado: o *fônon*. Podemos afirmar que o fônon está para as ondas elásticas (vibrações dos íons em um sólido) assim como o fóton está para as ondas eletromagnéticas.

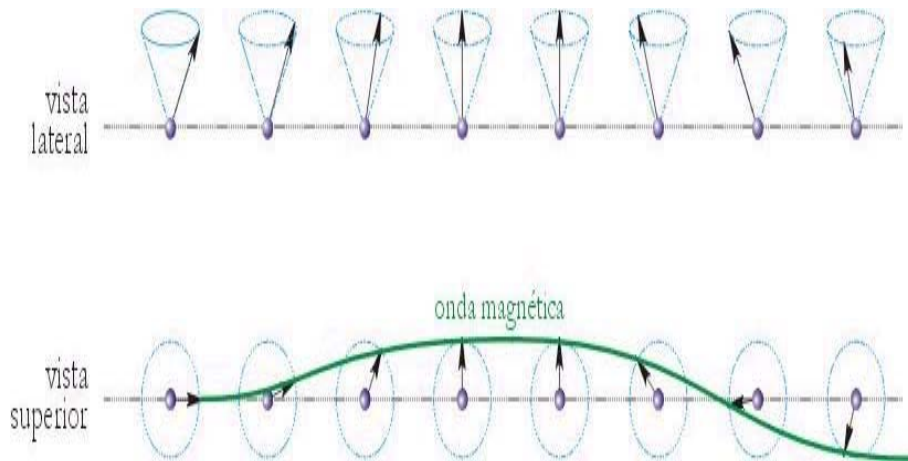
Considere agora o caso dos momentos magnéticos. Neste caso as

molares não são ligações químicas, mas a interação de Heisenberg (seção 6.1). Da mesma forma que os íons, o movimento de um momento magnético fará, através da interação de Heisenberg, com que todos os momentos se mexam, criando uma *onda magnética* que atravessa o sólido. O correspondente quântico da onda magnética é chamado de *mágnon*.

De uma maneira geral, qualquer movimento oscilatório que ocorra em um sólido terá um quantum associado. Um outro exemplo ocorre com o próprio gás de elétrons. A quantização das vibrações desse gás leva aos *plasmons* (a palavra vem de “plasma”, denominação dada a um gás neutro formado por partículas carregadas - ou seja, com partículas positivas e negativas em igual número). Existem ainda outros bichos quânticos estranhos, como os *hélicons*, os *excitons*, e vai por aí fora. Cada uma dessas partículas, ou como às vezes nos referimos, *excitações elementares da rede*, participa da *dinâmica* das interações dentro do sólido. Sob certo aspecto é como se o sólido fosse um “ecossistema” onde estranhos “animais” da fauna quântica co-existem, conferindo a ele suas características macroscópicas próprias.



Oscilações dos átomos em uma rede cristalina em torno de suas posições de equilíbrio ocorrem, por exemplo, quando o som atravessa o material. Assim como ondas eletromagnéticas são quantizadas em fótons, tais oscilações nos sólidos são quantizadas em *fônons*.



De forma análoga às oscilações elásticas descritas na figura anterior, oscilações magnéticas podem ser descritas em termos de “partículas magnéticas” chamadas de *mágnons*.

6.9 Trens que Flutuam!

Nesta seção vamos falar de um dos fenômenos mais bizarros e espetaculares da matéria condensada: a *supercondutividade*. Esta é outra importante área de especialização que tem gerado importantes resultados, com vastas possibilidades de utilização prática.

Embora a supercondutividade seja um fenômeno historicamente associado à perda de resistência elétrica de um material, ela também pode ser encarada como um estado magnético muito especial da matéria. Para entender o que é supercondutividade, vamos recordar o que vem a ser condutividade elétrica. Esta é “moleza”: está associada à lei de Ohm:

$$V = RI$$

Aplica-se uma voltagem V a um pedaço de fio, e aparece uma corrente I proporcional a V . R é a resistência, que está em parte associada à geometria do material, e em parte às suas características intrínsecas. Para recordar o que foi dito no capítulo anterior:

$$R = \frac{l}{A}\rho$$

onde l é o comprimento, A a área da seção transversal, e ρ a resistividade. É nesta última quantidade que estamos interessados. O inverso da resistividade é a *condutividade* σ :

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = \frac{ne^2\tau}{m^*}$$

Os símbolos da fração mais à direita já foram definidos anteriormente. Queremos aqui discutir especificamente o significado de τ . Este é

definido como o tempo médio entre colisões sucessivas dos elétrons com a rede. Mas, o que são exatamente essas colisões? Em uma visão clássica é muito simples entender: os elétrons se chocam com os íons da rede como se fossem bolas de gude se chocando contra bolas de boliche. Quanticamente a coisa é mais complicada. Elétrons podem interagir com fônons, mágnons, e outros ‘ons’ da rede; cada tipo de interação representa uma fonte potencial de espalhamento eletrônico¹², e portanto contribui para a resistividade do material. Quanticamente não dizemos que os elétrons se *chocam* com os íons, mas sim que os elétrons são *espalhados* pelas excitações da rede. Obviamente em um cristal não magnético não haverá mágnons, mas fônons estarão sempre presentes. De fato, fônons são, em geral, a principal fonte de resistividade dos sólidos cristalinos metálicos. Neste contexto, o tempo τ está associado às interações entre elétrons e fônons.

Passemos então aos supercondutores. Considere um sólido, metálico e não magnético, como por exemplo, o chumbo (Pb). Ao aplicarmos uma voltagem a um fio de chumbo, aparecerá uma corrente elétrica, que obedecerá à lei de Ohm, $V = RI$. O principal mecanismo de resistividade neste caso é o espalhamento dos elétrons por fônons. No entanto, se diminuirmos a temperatura do chumbo abaixo de 8 K (cerca de -265 celsius), algo surpreendente acontece: a resistividade elétrica do chumbo desaparece, e ele se transforma em um *supercondutor*. É como se os fônons tivessem desaparecido subitamente, ou deixassem por

¹²Aqui, a palavra “espalhamento” significa que a interação do elétron com os “ons” da rede, leva a uma mudança de estado quântico do elétron. Por exemplo, se o estado do elétron antes da interação ocorrer for representado por um vetor de onda \mathbf{k}_1 , após a interação ele terá sido *espalhado* para um outro estado \mathbf{k}_2 .

alguma razão de espalhar os elétrons, que então se deslocam livremente. Um supercondutor é capaz de transportar corrente elétrica mesmo sem voltagem aplicada!

Aqui vale um comentário: assim como a ordem magnética nos materiais, a supercondutividade é antes um *estado* da matéria. Estritamente, não devemos dizer que este ou aquele material *é* supercondutor, mas que apenas *está* em um estado supercondutor. O mesmo comentário vale para os materiais magnéticos. É mais correto dizermos que tal material está em um *estado ferromagnético*, e não que ele *é* ferromagnético. No entanto, na medida em que soubermos do que estamos falando, esse detalhe não será importante.



Em um metal normal, a resistividade elétrica decai de forma suave com o decréscimo da temperatura. Em um supercondutor, a resistividade cai abruptamente para zero em uma temperatura característica de cada material.

O chumbo não é o único elemento da tabela periódica a apresentar

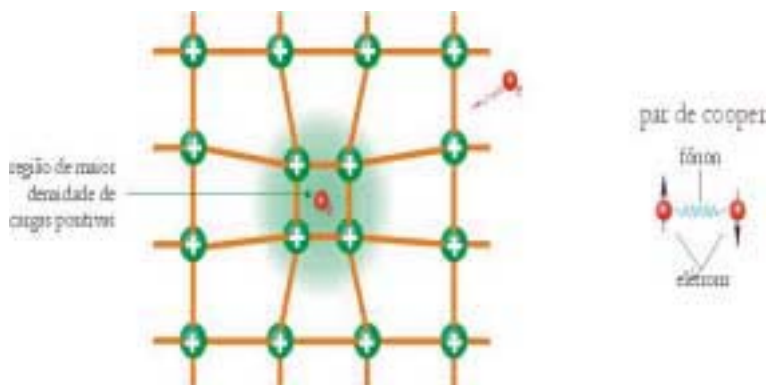
supercondutividade. Mais de 26 outros elementos se tornam supercondutores abaixo de uma certa temperatura crítica, que é característica de cada material. Mas como o “milagre” acontece? Não é tão simples de entender. Só para dar uma idéia, embora a supercondutividade tenha sido descoberta em 1911 (no mercúrio), o fenômeno permaneceu sem uma explicação satisfatória até 1957, quando então três físicos americanos, Bardeen, Cooper e Schriffer propuseram uma teoria quântica que explicou o fenômeno. Esta teoria ficou conhecida como a *teoria BCS* da supercondutividade.

Existem dois ingredientes fundamentais na teoria BCS: os chamados *pares de Cooper*, e a existência de um *hiato* de energia entre o estado normal e o estado supercondutor. Vamos entender o que é isto.

Considere um elétron que se desloca em uma rede cristalina. Como o elétron possui carga negativa, ele atrai para si os íons positivos da rede. Ao fazer isso, o elétron acaba por criar uma densidade de cargas positivas a sua volta (1 elétron atrai vários íons simultaneamente). Um segundo elétron que estiver passando por perto se sentirá atraído para essa região. Tudo se passa como se os íons da rede intermediassem uma interação entre os dois elétrons. A novidade é que essa interação é *atrativa!* Os elétrons ligados desse jeito formam um *par de Cooper*. Veja como o mundo é cheio de surpresas: aprendemos a vida inteira que cargas de mesmo sinal, como dois elétrons, se repelem. No entanto, dentro de um sólido, e sob certas condições, elétrons se comportam como se atraíssem um ao outro! À medida que os elétrons do par se deslocam pela rede, a deformação local que ele cria também se propaga. Mas como vimos, deformações da rede são ondas elásticas,

que na linguagem da mecânica quântica se tornam fônons. Portanto podemos afirmar que são os fônons que servem de “cola” para unir os elétrons em um par de Cooper. Um metal que contenha n elétrons por unidade de volume, poderá formar no máximo $n/2$ pares de Cooper. É interessante ressaltar o papel singular dos fônons para a dinâmica da rede: no estado normal eles espalham os elétrons e são responsáveis pela resistividade do material; no estado supercondutor eles formam os pares de Cooper, e levam ao desaparecimento da resistividade do material.

Resumindo: em um supercondutor quem transporta a corrente elétrica não são elétrons, mas sim pares de Cooper, formados por dois elétrons e 1 fônon. A teoria BCS mostra que os pares de Cooper se formam preferencialmente entre elétrons com spins opostos.

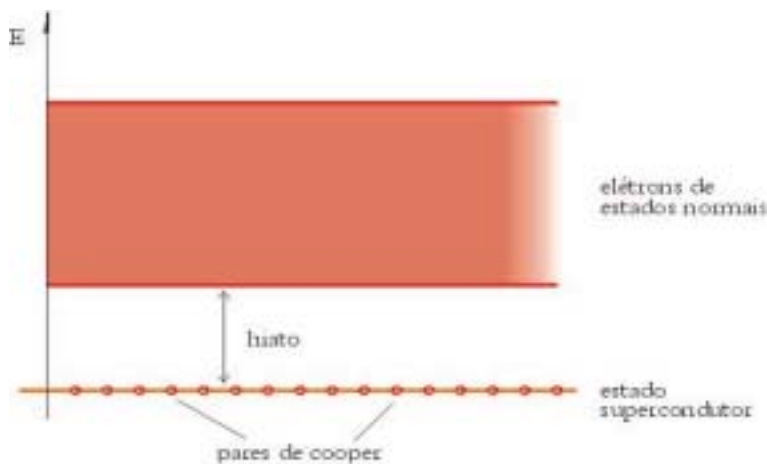


Um par de Cooper é uma partícula composta por dois elétrons de spins opostos, ligados por um fônon. Esta estranha partícula é o ingrediente essencial para compreendermos a supercondutividade. Ela é formada porque ao se deslocar pela rede, um elétron atrai para si os íons positivos que estão a sua volta, criando uma região

com densidade de carga positiva em excesso, que por sua vez atrai outro elétron.

Agora vem o segundo ingrediente fundamental da supercondutividade: por que os pares de Cooper podem se mover livremente sem serem espalhados, enquanto que elétrons normais não? Se um par de Cooper fosse espalhado, ele ganharia energia, e portanto passaria para outro estado. A teoria BCS mostra que no estado supercondutor os pares de Cooper se encontram em um nível de energia abaixo daqueles níveis correspondentes aos elétrons independentes. Ou seja, energeticamente é mais econômico formar pares de Cooper. A teoria mostra também que entre o estado de pares de Cooper, e de elétrons normais, existe um hiato de energia¹³. Para espalhar um par de Cooper é preciso que este ganhe energia suficiente para passar por cima do hiato e portanto romper a ligação entre os elétrons do par! A baixas temperaturas a ocorrência desse processo é muito improvável, mesmo na presença de um campo elétrico aplicado. Conseqüentemente os pares de Cooper não são espalhados, e podem se mover livremente na direção do campo, com resistividade zero!

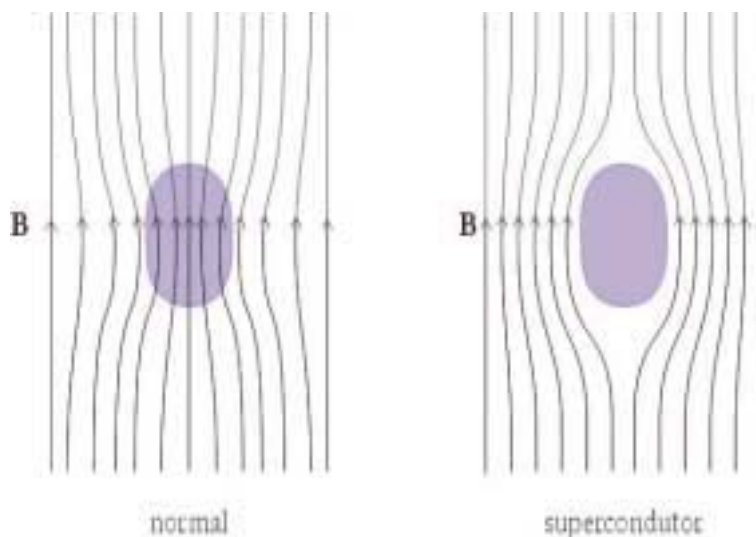
¹³A situação é de certa forma semelhante à dos semicondutores. Contudo, nos semicondutores hiatos separam estados normais eletrônicos em bandas distintas; nos supercondutores o hiato separa os estados normais do estado supercondutor.



A principal descoberta da teoria BCS da supercondutividade foi a existência de um hiato de energia entre o estado normal e o estado supercondutor dos elétrons. Quando no estado supercondutor, a probabilidade dos elétrons sofrerem espalhamento vai para zero, conseqüentemente fazendo “explodir” a condutividade elétrica.

Mas, o que isso tudo tem a ver com magnetismo? Acontece que supercondutores possuem uma outra característica importante além da resistividade elétrica zero. Eles *expelam* campos magnéticos de seu interior. Se você aproximar um ímã de um metal comum, o campo magnético gerado pelo ímã penetra no metal, mas não penetra em um supercondutor. É como se o supercondutor se comportasse como um outro ímã com a mesma polaridade (como todo mundo sabe, o pólo norte de um ímã atrai o pólo sul e repele outro pólo norte). Este fenômeno, chamado de *efeito Meissner* (Meissner é o sobrenome do cidadão que descobriu o efeito. Como você já deve ter notado, os físicos adoram batizar novos efeitos com nomes de físicos. É uma questão de

modéstia.), está associado à existência da supercorrente. Ao tentarmos aproximar o ímã do supercondutor, a corrente supercondutora começa a formar espiras de corrente dentro do material, de modo a gerar um campo magnético que *exatamente* cancele o campo do ímã. Essa repulsão tem um efeito interessante: ao largarmos um pedaço de um ímã sobre a superfície de um supercondutor, a repulsão magnética devida ao efeito Meissner, fará com que o ímã flutue no espaço! Não é maravilhoso? Tem gente por aí que também diz saber flutuar (além fazer chover e ventar - mediante irrisórias gratificações). Vai ver que essas pessoas possuem pares de Cooper nas solas dos pés!



O efeito Meissner é a base da levitação magnética. Um supercondutor abaixo da sua temperatura crítica expelle linhas de indução magnética de seu interior. Se um ímã for colocado sobre a superfície de um supercondutor, o efeito fará com que o ímã flutue.

Supercondutores são obviamente materiais que possuem grande po-

tencial tecnológico. A possibilidade de transportar corrente elétrica de um ponto a outro de um fio sem perdas (isto é, com resistência zero) é fantástica! O principal empecilho, contudo, ainda não foi transposto: as baixas temperaturas necessárias. Materiais simples, como o chumbo, o vanádio (V), o alumínio (Al) entre outros, só se tornam supercondutores a temperaturas extremamente baixas. Manter um fio a esta temperatura sai mais caro do que a perda de energia elétrica que seria evitada.

Um outro tipo de aplicação tecnológica com supercondutores utiliza o efeito Meissner: trens que flutuam! Se o trilho de um trem for magnético, e o seu fundo supercondutor, em princípio poderia flutuar. De fato, tal “milagre” já foi realizado, como provavelmente você já viu na televisão. No Japão, pesquisas sobre motores de propulsão linear de veículos que não fazem contato com o solo começaram no início dos anos 60. Nos anos 70 os japoneses estudavam sistemas de levitação eletromagnética utilizando supercondutores, e no início dos anos 80 puseram um trem desses para andar a 517 km/h! O programa se desenvolveu, para o que hoje eles chamam de *Maglev*. No *Maglev* o supercondutor está dentro do trem, enquanto que na pista estão espiras especiais que geram um campo magnético, que fazem o trem flutuar.

Desde 1986 novos materiais supercondutores têm sido descobertos. Os chamados *novos supercondutores* possuem temperaturas críticas muito mais elevadas que os supercondutores tradicionais. Eles, em geral, possuem fórmulas químicas pavorosas, como por exemplo, o composto $\text{Tl}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}$, cuja temperatura crítica é de 125 K (- 148 C). Um fato curioso é que a temperaturas normais esses materiais não são con-

dutores, mas isolantes! A física desses materiais continua obscura, e não se sabe bem como se dá o fenômeno da supercondutividade neles. Não se sabe também se será possível alcançar a supercondutividade a temperaturas que tornem esses materiais de utilização prática trivial, como por exemplo, a confecção de um fio. Se isso acontecer, estaremos diante de uma nova revolução tecnológica!

Onde saber mais: deu na Ciência Hoje.

1. *A Dança dos Spins*, Sergio M. Rezende, vol. 14, no. 80, p. 28.
2. *Os Ferrofluidos*, Antônio Martins Figueiredo Neto, vol. 4, no. 23, p. 9.
3. *Tomografia por Ressonância Magnética Nuclear: Novas Imagens do Corpo*, Horácio Panepucci, José Pedro Donoso, Alberto Tannús, Nicolau Beckman e Tito Bonagamba, vol. 4, no. 20, p. 46.
4. *Vidros de Spin: Novos Desafios do Magnetismo*, Múcio Continentino, vol. 3, no. 16, p. 72.
5. *Mais um Prêmio para a Supercondutividade*, Ney F. Oliveira Jr., vol. 7, no. 39, p. 10.
6. *Supercondutividade*, Carlos Balseiro e Francisco de la Cruz, vol. 9, no. 49, p. 26.
7. *Uma Surpresa na Supercondutividade*, Múcio Amado Continentino, vol. 13, no. 75, p. 8.
8. *Supercondutores: a Batalha dos Nanossegundos*, Virgílio Augusto F. de Almeida, vol. 5, no. 25, p. 62.
9. *Novos Supercondutores: Revolução Tecnológica à Vista*, Eugênio Lerner, vol. 6, no. 33, p. 10.
10. *Ecos de Corrente: Novos Desafios à Física Experimental*, Ivan S. Oliveira, vol. 22, no. 130, p. 58.
11. *Computação Quântica: a última fronteira da informação*, Ivan S. Oliveira
12. *Superpoderes dos Nanomagnetos*, Marcelo Knobel, vol. 27, no. 159, p. 32
13. *Desmagnetização Adiabática: opção econômica e ecológica para refrigeração*, Pedro J. von Ranke, vol. 26, no. 155, p.34
14. *Biomagnetismo: Nova Interface entre a Física e a Biologia*, D. Barros de Araújo, A.A. Oliveira Carneiro, E.R. Moraes e O. Baffa, vol. 26, no. 156, p. 24

Resumo - Capítulo Seis

Dois ingredientes fundamentais são necessários para entendermos o magnetismo na matéria: a existência de momentos magnéticos atômicos, e o princípio de exclusão de Pauli. Momentos magnéticos atômicos originam-se do movimento orbital de elétrons no átomo, e do momento angular de spin. Dizemos que um dado material possui ordem magnética se os momentos atômicos estiverem apontados, na média, para direções regulares no espaço. A ordem magnética dos materiais pode ser explicada através da interação de Heisenberg, uma interação de origem inteiramente quântica, sem análogo clássico. Ela é sempre destruída acima de uma certa temperatura, chamada de temperatura crítica. A temperatura crítica nos dá uma noção da intensidade da interação de troca, responsável pela ordem magnética. A maioria dos núcleos atômicos possui momento magnético. O magnetismo nuclear é muito mais fraco do que o magnetismo atômico, mas nem por isso é menos importante. Momentos magnéticos nucleares quando em um campo magnético adquirem uma frequência natural chamada de frequência de Larmor. Nesta situação, eles podem absorver energia de uma onda eletromagnética que incida sobre o sistema com a mesma frequência; este é o fenômeno da ressonância magnética nuclear, ou RMN. Dentre as várias aplicações da RMN, podemos gerar imagens internas de objetos, inclusive de organismos vivos em funcionamento. Um tipo muito especial de material magnético são os supercondutores. Em um supercondutor, sob determinadas condições, os elétrons se ligam aos pares formando uma partícula chamada de par de Cooper. Pares de Cooper praticamente não sofrem espalhamento ao se deslocarem dentro do material, o que faz com que a resistividade elétrica de um supercondutor seja zero. Supercondutores possuem a propriedade de expelir campos magnéticos de seu interior. Esta característica é utilizada para fazer levitação magnética de objetos, como trens. Uma das dificuldades para a utilização prática dos supercondutores são as baixas temperaturas críticas, o que encarece a manutenção do estado supercondutor. A partir do final da década de 80 novos materiais supercondutores foram descobertos. Estes possuem temperaturas críticas mais elevadas do que os supercondutores tradicionais. Embora haja um grande número de investigações experimentais acerca desses novos supercondutores, não existe no momento uma compreensão teórica satisfatória sobre os mecanismos de supercondutividade nesses materiais.