

Conteúdo

Lista de Figuras	iii
Lista de Tabelas	vi
Prefácio	vii
1 Introdução	1
1.1 O que são magnetos moleculares?	1
1.2 História dos magnetos moleculares	3
1.2.1 Magnetismo orgânico	4
1.2.2 Magnetismo de sistemas metal-orgânicos	7
2 Fundamentos I: Aspectos químicos	11
2.1 Magnetos orgânicos	11
2.1.1 Compostos de nitróxido de nitronil	11
2.1.2 Poli-radicais magnéticos	12
2.1.3 Radicais de verdazil	13
2.1.4 Compostos sulfurosos	13
2.1.5 Fullerenos	14
2.2 Magnetos metal-orgânicos	15
2.2.1 Sistemas de camada fechada	16
2.2.2 Sistemas de camada aberta	17
2.3 Magnetos uni-moleculares	18
2.4 Magnetos inorgânicos	20
2.4.1 Sistemas de reduzida dimensionalidade	20
2.4.2 Polioxometalatos	21
3 Fundamentos II: Aspectos físicos	27
3.1 Mecânica Quântica	27
3.1.1 Orbitais atômicos	27
3.1.2 Desdobramento orbital devido ao campo cristalino	30
3.1.3 <i>Quench</i> do momento angular	33
3.1.4 Operadores de spin	34
3.1.5 Expansão do espaço de Hilbert	36
3.1.6 Transformações unitárias e mudança de base	39
3.1.7 Acoplamento de N spins: base seqüencial	39
3.1.8 Mais sobre auto-estados na base acoplada	47
3.1.9 Acoplamento de N spins: base não-seqüencial	48
3.1.10 Teoria de perturbação	48
3.2 Interações e Hamiltonianas para magnetos moleculares	52
3.2.1 Interação direta	52

3.2.2	Interação indireta: supertroca	56
3.2.3	Interação anti-simétrica	57
3.2.4	Interação spin-órbita	58
3.2.5	Interação Zeeman	59
3.2.6	O tensor g	60
3.2.7	Interação dipolar	61
3.2.8	O Tensor \mathcal{D}	62
3.2.9	Acoplamento de tensores \mathcal{D} : dipolar e local	63
3.2.10	Resumo das Hamiltonianas	64
3.3	Termodinâmica e Mecânica Estatística	65
3.3.1	Potenciais termodinâmicos	66
3.3.2	Quantidades termodinâmicas	66
3.3.3	Função partição e conexão com a termodinâmica	67
3.4	Mais sobre susceptibilidades magnéticas	73
3.4.1	Susceptibilidade de van Vleck	73
3.4.2	Paramagnetismo de van Vleck	77
3.4.3	Diamagnetismo	77
3.5	Elaboração de modelos	78
4	Técnicas experimentais	85
4.1	Quantidades termodinâmicas	85
4.1.1	Magnetização	85
4.1.2	Susceptibilidade magnética AC	87
4.1.3	Calor Específico	89
4.2	Técnicas Neutrônicas	91
5	Magnetismo zero-dimensional: caso isotrópico	93
5.1	Dímeros	93
5.2	Trímeros	96
5.3	Tetrâmeros	100
5.4	Exemplos	102
6	Magnetismo zero-dimensional: outras interações	109
6.1	Anisotropia local magnetocristalina	109
6.1.1	Axial	109
6.1.2	Rômbica e axial	113
6.2	Interação dipolar	115
6.3	Interação anti-simétrica	118
6.4	Magnetos uni-moleculares: um exemplo	122
7	Magnetismo uni-dimensional	127
7.1	Cadeias regulares uni-metálicas	127
7.1.1	Modelo de Heisenberg isotrópico: $s = 1/2$ (Bonner-Fisher) e $s = 1$	128
7.1.2	Haldane <i>gap</i>	129
7.1.3	Modelo de Heisenberg isotrópico: limite clássico (Fisher)	129
7.1.4	Modelo de Ising	131
7.2	Cadeias regulares duo-metálicas	134
7.3	Cadeias irregulares uni-metálicas	137
7.3.1	Transição spin-Peierls	139

7.4 Exemplos	141
8 Aplicações e desafios	147
8.1 Aplicações	147
8.2 Desafios	149
A Rotinas computacionais	151
B Unidades em magnetismo	153
C Algumas constantes físicas	155
D Tabela periódica	157
Referências	157
Índice Remissivo	167