

Quantização dos momentos magnéticos

Componente Orbital

- Os números quânticos ℓ e m_ℓ definem a componente orbital do momento angular e magnético ao longo de um eixo fixo (z)

MOMENTO ANGULAR		MOMENTO MAGNÉTICO
$\begin{cases} m_\ell \cdot \hbar \\ \sqrt{\ell(\ell+1)} \cdot \hbar \end{cases}$	$\begin{matrix} \nwarrow \text{Na direção z} \\ \longleftarrow \text{magnitude} \end{matrix}$	$\begin{cases} m_\ell \cdot \mu_B \\ \sqrt{\ell(\ell+1)} \cdot \mu_B \end{cases}$
$-\ell \leq m_\ell \leq \ell$		

CAMADAS ELETRÔNICAS

O número quântico principal (n) indica o nível de energia.

camada						
K	L	M	N	O	P	Q
1	2	3	4	5	6	7
nível						

O número máximo de elétrons em cada nível é dado por $2n^2$. Entre os átomos conhecidos, no estado fundamental, o número máximo de elétrons num mesmo nível é 32.

K	L	M	N	O	P	Q
2	8	18	32	32	18	2

SUBNÍVEIS DE ENERGIA

O número quântico secundário ou azimutal (ℓ) indica a energia do elétron no subnível. Nos átomos conhecidos, no estado fundamental, há quatro subníveis, representados por s, p, d, f, em ordem crescente de energia

$$\ell = (n-1), (n-2), (n-3), \dots, 0$$

Subnível	s	p	d	f
Número quântico azimutal	$\ell = 0$	$\ell = 1$	$\ell = 2$	$\ell = 3$
Número máximo de elétrons	2	6	10	14

Subníveis conhecidos em cada nível de energia:

Nível	K	L	M	N	O	P	Q
	1	2	3	4	5	6	7
Subnível	1s	2s 2p	3s 3p 3d	4s 4p 4d 4f	5s 5p 5d 5f	6s 6p 6d	7s

Subníveis em ordem crescente de energia:

1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d

ORBITAIS

Os subníveis são formados de orbitais.

Orbital é a região da eletrosfera onde há maior probabilidade de estar localizado o elétron do átomo.

O número máximo de elétrons em cada orbital é 2.

A cada orbital foi atribuído um número quântico magnético (m_ℓ) cujo valor varia de $-\ell$ a $+\ell$, passando por zero.

[illegible]

Componente Spin

- Associada ao momento magnético intrínseco do elétron.
- Os números quânticos s e m_s definem a componente spin do momento angular e magnético.
- Para um elétron $s = \frac{1}{2}$ e $m_s = \pm \frac{1}{2}$

MOMENTO ANGULAR

$$\begin{cases} m_s \cdot \hbar \\ m_s = s, s-1, s-2, \dots, -s \end{cases}$$

$$(2s+1) \text{ valores} = 2$$

MOMENTO MAGNÉTICO

$$\begin{cases} + \mu_B & \text{(up)} \\ - \mu_B & \text{(down)} \end{cases}$$

MOMENTO MAGNÉTICO - SPIN

Orbital → constante giromagnética

$$\gamma = \frac{\mu_m}{L} = -\frac{e}{2m} = -g \frac{\mu_B}{\hbar} \rightarrow g = 1$$

Spin → constante giromagnética

$$\gamma = \frac{\mu_m}{L} = -\frac{e}{m} = -g \frac{\mu_B}{\hbar} \rightarrow g = 2$$

g é o fator de Landé → cálculo da energia usando teoria de perturbação de primeira ordem de um átomo para um campo magnético uniforme fraco.

MOMENTO MAGNÉTICO SPIN

$$g \cdot m_s \cdot \mu_B \rightarrow \text{na direção } z$$

$$\sqrt{s(s+1)} \cdot g \cdot \mu_B \rightarrow \text{magnitudo}$$

Para o elétron $s = 1/2$ e o tamanho do spin é $\frac{\sqrt{3} \cdot g \cdot \mu_B}{2}$.

Já o valor na direção z é $\pm \mu_B$

A energia do elétron em um campo magnético será:

$$E = g \cdot \mu_B \cdot m_s \cdot B = \pm \mu_B \cdot B$$

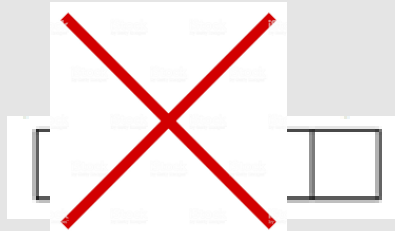
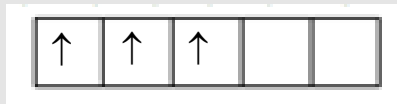


SEPARAÇÃO DE ZEEMAN

Leis de Hund

- 1. Elétrons preferem ter a mesma componente de spin, o que reduz a probabilidade de passar de uma órbita para outra já ocupada (Princípio de exclusão de Pauli)
- 2. Eles preferem ficar em órbitas diferentes, pois a repulsão coulombiana é menor.

•Exemplo: $3d^3$



Acoplamento Spin-Órbita ou Russel-Saunders

- Interações entre momentos orbital e spin

$$-\lambda. \vec{l}_i \cdot \vec{s}_j$$

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

Em um único átomo de muitos elétrons ...

- **L interage com S**  **J**

- A energia de interação $H_{SO} = -\lambda. \vec{L} \cdot \vec{S}$
 - $\lambda < 0$, se a camada for preenchida menos que a metade.
 - $\lambda > 0$, se a camada for preenchida mais que a metade

Átomos de muitos elétrons

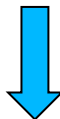
- Momento de spin (S) e orbital (L) totais do subnível

- $$L = \sum_{-l}^l m_l \quad e \quad S = \sum_{-s}^s m_s$$

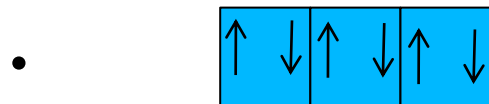
- Para uma camada preenchida:

- $L=0 \quad e \quad S=0 \quad J=0$

- $l=1 \quad l=0 \quad l=-1 \quad \longrightarrow$



não é magnético



Multipletos

- Caracterizados por um número quântico J
- $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$; $J^2 = L^2 + 2 \cdot \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + S^2$
- $2J+1$ estados: $-J \leq M_J \leq J$
 $-J, (-J+1), (-J+2), \dots, 0, \dots, (J-2), (J-1), J$

Momento Magnético Total $\begin{cases} -g_J \mu_B M_J & - \text{direção} \\ \sqrt{J(J+1)} g_J \mu_B & - \text{magnitude} \end{cases}$

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

- A energia do multiplete é: $H_{SO} = -\lambda \cdot \vec{L} \cdot \vec{S}$

- Substituindo-se o valor de L.S, obtém-se

$$E_J = -\frac{\lambda}{2} \{J(J+1) - S(S+1) - L(L+1)\}$$

O estado fundamental (de menor energia) é tal que:

- $J = L+S$, se o subnível for preenchido **mais que a metade**.
- $J = L-S$, se o subnível for preenchido **menos que a metade**.
- $J = S, L = 0$ se o subnível está **cheio**.

Notação Espectroscópica

L=

0	1	2	3	4	5	6
S	P	D	F	G	H	I

$$2S+1 \quad L_J$$

$m_\ell=3$ $m_\ell=2$ $m_\ell=1$ $m_\ell=0$ $m_\ell=-1$ $m_\ell=-2$ $m_\ell=-3$



Exemplo: Ce^{+3} ($4f^1$)

$L = 3$

$S = 1/2$

$2S+1 = 2$

$J = L-S = 5/2$

$$2 \quad F_{5/2}$$

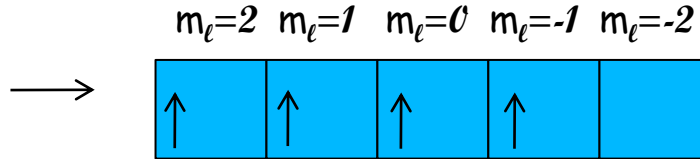
Exemplos de Cálculo de J

$\text{Fe}^{+2} (3d^4)$

$L = 2$

$S = 2$

$J = L - S = 0$

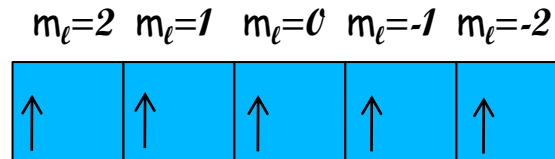


$\text{Fe}^{+3} (3d^5)$

$L = 0$

$S = 2,5$

$J = S = 2,5$



Veja o livro do COEY, Magnetism and Magnetic Materials, capítulo 4, para mais detalhes