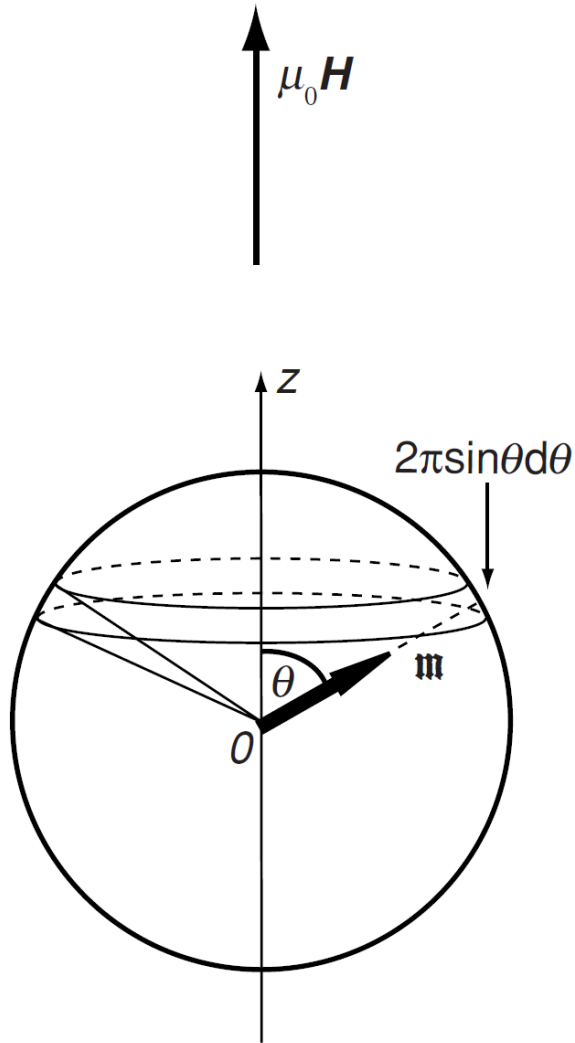


# PARAMAGNETISMO

—

**Fenomenologia Quântica**

# Paramagnetismo Clássico



- No caso do paramagnetismo clássico foi considerado que o momento magnético aponta para qq. direção, ou seja, varia continuamente com o ângulo  $\theta$
- $(m_0 \cdot \cos\theta)$ .

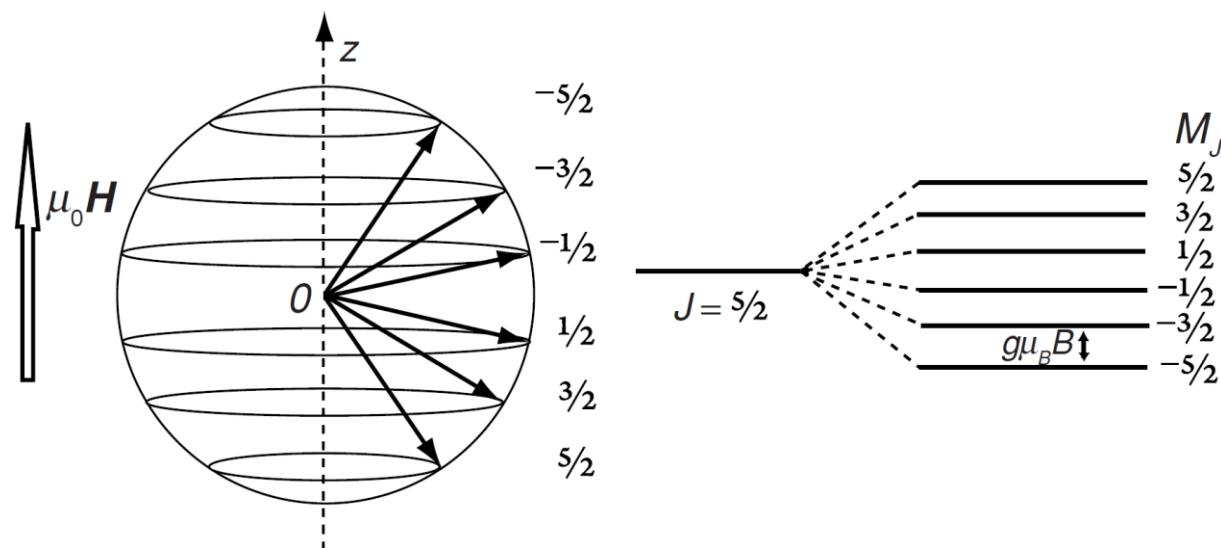
## Porém!

- Os momentos magnéticos, orbitais e de spin, são quantizados (apresentam valores discretos).

$$J = 5/2$$

Momento magnético quântico em um campo aplicado  $H$ .

## Paramagnetismo Quântico



# Susceptibilidade no Paramagnetismo Quântico Teoria de Brillouin

## Momento magnético

- Caso clássico:  $m_z = -m_0 \cdot \cos\theta$
- Caso Quântico:  $m_z = -g_J \cdot \mu_B \cdot M_J$  com  $-J \leq M_J \leq J$  e  $M_J$  variando de 1 em 1.
- $J$  pode ser um  $n^\circ$  inteiro ou semi-inteiro.

A energia do  
momento magnético  
em um campo  $B = \mu_0 H$   
é:

$$E = -m_z \cdot B$$

$$E = \mu_0 \cdot \boxed{g_J \cdot \mu_B \cdot M_J} H$$

$$J = L + S$$

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

# Susceptibilidade

## Paramagnetismo Quântico

$$-m_0 \cdot \cos\theta \rightarrow -g_J \cdot \mu_B \cdot M_J$$



$$\int \rightarrow \sum$$

- A magnetização pode ser dada por:

$$M = N \cdot \langle m_z \rangle \quad \langle m_z \rangle = \frac{\sum m_z e^{-\frac{E}{k_B T}}}{\sum e^{-\frac{E}{k_B T}}}$$



$$M = \frac{N \sum m_z e^{-\frac{E}{k_B T}}}{\sum e^{-\frac{E}{k_B T}}}$$

$E$  e  $m_z$  dependem de  $M_J \rightarrow \Sigma$  sobre  $M_J$ .

$$E = \mu_0 \cdot g_J \cdot \mu_B \cdot M_J \cdot H$$

$$m_z = -g_J \cdot \mu_B \cdot M_J$$

$$E = \mu_0 \cdot g_J \cdot \mu_B \cdot M_J \cdot H$$

$$\frac{E}{k_B T} = \frac{\mu_0 \cdot g_J \cdot \mu_B \cdot M_J \cdot H}{k_B T}$$

$$m_z = -g_J \cdot \mu_B \cdot M_J$$



$$M = \frac{N \sum_{-M_J}^{M_J} m_z e^{-\frac{E}{k_B T}}}{\sum_{-M_J}^{M_J} e^{-\frac{E}{k_B T}}}$$

Calculando-se

$$\sum_{-M_J}^{M_J} e^{-\frac{E}{k_B T}}$$

Multiplica-se por J no numerador e no denominador:

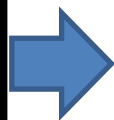
$$\frac{E}{k_B T} = \frac{\mu_0 \cdot g_J \cdot \mu_B \cdot H \cdot \cancel{J} M_J}{k_B T \cancel{J}} \quad \frac{E}{k_B T} = \frac{x \cdot M_J}{J} \quad \text{onde} \quad x = \frac{\mu_0 \cdot g_J \cdot \mu_B \cdot J \cdot H}{k_B T}$$

$$Z = \sum e^{-\frac{E}{k_B T}} \quad \Rightarrow \quad Z = \sum_{M_J} e^{-\frac{M_J}{J} x}$$

$$E = \mu_0 \cdot g_J \cdot \mu_B \cdot M_J \cdot H$$

$$\frac{E}{k_B T} = \frac{\mu_0 \cdot g_J \cdot \mu_B \cdot M_J \cdot H}{k_B T}$$

$$m_z = -g_J \cdot \mu_B \cdot M_J$$



$$M = \frac{N \sum_{-M_J}^{M_J} m_z e^{-\frac{E}{k_B T}}}{\sum_{-M_J}^{M_J} e^{-\frac{E}{k_B T}}}$$



$$m_z = -g_J \cdot \mu_B \cdot M_J$$

$$M_0 = N \cdot g_J \cdot \mu_B \cdot J$$

Calculando-se

$$N \sum m_z e^{-\frac{E}{k_B T}}$$

$$- \sum \frac{\overset{M_0}{\underbrace{N g_J J \mu_B M_J}}}{J} e^{-\frac{E}{k_B T}} = - \sum \frac{M_0 M_J}{J} e^{-\frac{M_J}{J} x} \rightarrow$$

- Portanto, a magnetização pode ser escrita como:

$$M = -M_0 \frac{\sum_{-M_J}^{M_J} \frac{M_J}{J} e^{-\frac{M_J}{J} x}}{\sum_{-M_J}^{M_J} e^{-\frac{M_J}{J} x}}$$

e como:

$$Z = \sum_{-M_J}^{M_J} e^{-\frac{M_J}{J} x}$$

$$M = M_0 \frac{1}{Z} \frac{dZ}{dx}$$

$$Z = \sum_{-M_J}^{M_J} e^{-\frac{M_J}{J}x}$$



Isto é a soma de uma  
Progressão Geométrica

Essa Progressão Geométrica tem  $n = (2J+1)$  termos, a razão é  $q = e^{x/J}$  e o primeiro termo  $a_1 = 1$

$$S = \frac{a_1(1 - q^n)}{(1 - q)}$$

**Para detalhes: COEY,  
Magnetism and  
Magnetic Materials,  
capítulo 4, pg 107**

$$S = \frac{1 \cdot (1 - (e^{x/J})^{2J+1})}{(1 - e^{\frac{x}{J}})} = \frac{1 - e^{\frac{2J+1}{J}x}}{1 - e^{\frac{x}{J}}}$$

$$Z = \sum_{-J}^J e^{-\frac{M_J}{J}x}$$

$$M = M_0 \frac{1}{Z} \frac{dZ}{dx}$$

$$Z = \frac{\sinh\left(\frac{2J+1}{2J}x\right)}{\sinh\left(\frac{x}{2J}\right)}$$



$$M = M_0 \frac{1}{Z} \frac{dZ}{dx} = M_0 B_J(x)$$



$$B_J(x) = \left\{ \frac{2J+1}{2J} \coth \frac{2J+1}{2J}x - \frac{1}{2J} \coth \frac{x}{2J} \right\}$$



$$M = M_0 \left\{ \frac{2J+1}{2J} \coth \frac{2J+1}{2J}x - \frac{1}{2J} \coth \frac{x}{2J} \right\}$$

$$M = M_0 \left\{ \frac{2J+1}{2J} \coth \frac{2J+1}{2J} x - \frac{1}{2J} \coth \frac{x}{2J} \right\} \quad x = \frac{\mu_0 \cdot g_J \cdot \mu_B \cdot J \cdot H}{k_B T}$$

- Para  $x$  pequeno, significando baixos campos e/ou altas temperaturas:

$$\coth x = x + \frac{1}{3}x^3 + \frac{1}{5}x^5 + \frac{1}{7}x^7 + \frac{1}{9}x^9 + \dots$$

$$\mathcal{B}_J(x) \approx \frac{(J+1)}{3J}x - \frac{[(J+1)^2 + J^2](J+1)}{90J^2}x^3 + \dots$$

$$B_J(x) \approx \left( \frac{(J+1)}{3J} x \right) - \left[ \frac{(J+1)}{3J} x^3 + \dots \right]$$

$$M = M_0 B_J(x) \quad \Rightarrow \quad M = M_0 \frac{(J+1)}{3J} x$$

$$M_0 = N \cdot g_J \cdot \mu_B \cdot J$$

$$x = \frac{\mu_0 \cdot g_J \cdot \mu_B \cdot J \cdot H}{k_B T}$$

$$M = \frac{N g_J^2 \mu_B^2 J(J+1) \mu_0}{3 k_B T} H$$

$$M = \frac{N g_J^2 \mu_B^2 J(J+1) \mu_0}{3 k_B T} H$$

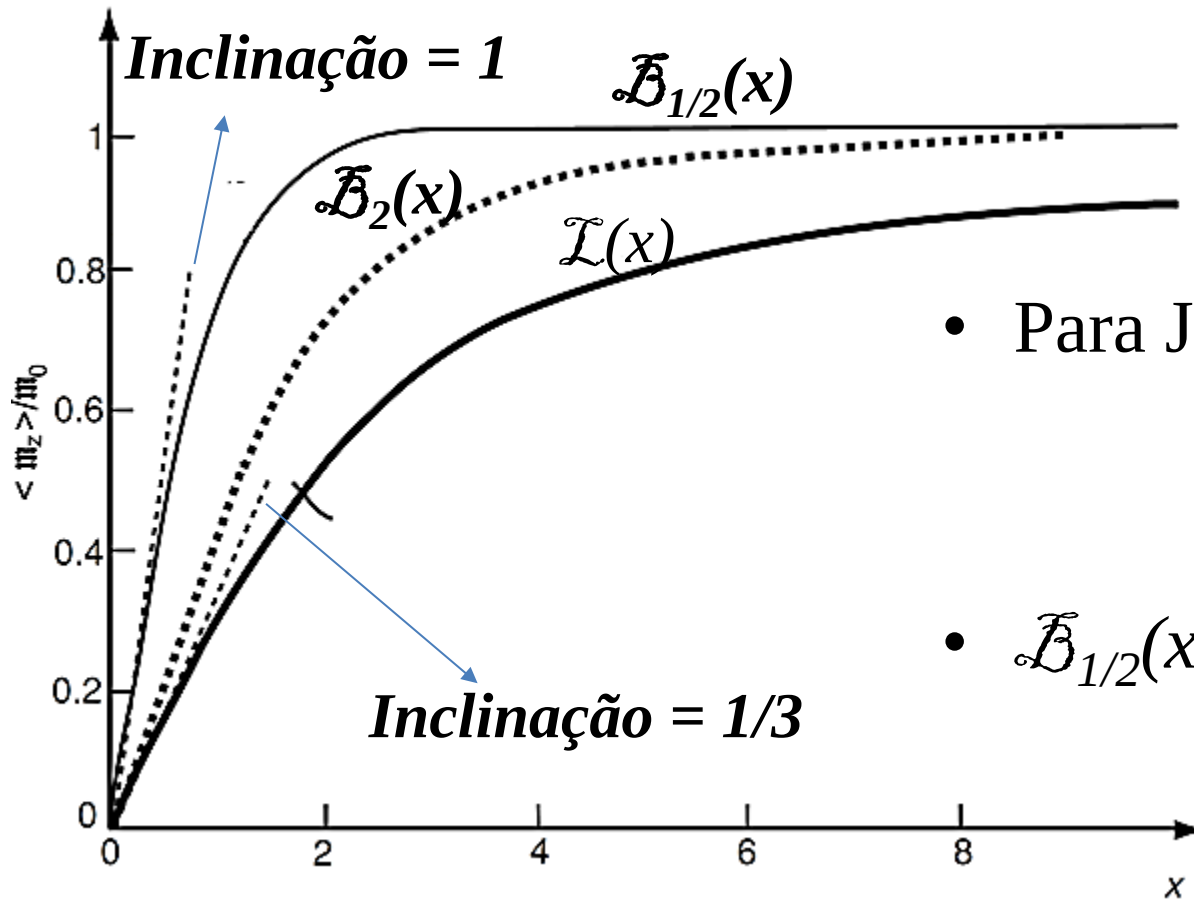


$$\chi = \frac{N g_J^2 \mu_B^2 J(J+1) \mu_0}{3 k_B T}$$

$$\chi = \frac{C}{T} \quad \Rightarrow \quad C = \frac{N m_{eff}^2 \mu_0}{3 k_B}$$

- Onde:  $m_{eff} = \sqrt{J(J+1)} \cdot g_J \cdot \mu_B$   
 $m_z = -g_J \cdot M_J \cdot \mu_B$

$\bar{\mathcal{B}}_J(x) \rightarrow \mathcal{L}(x)$  no limite  $J \rightarrow \infty$



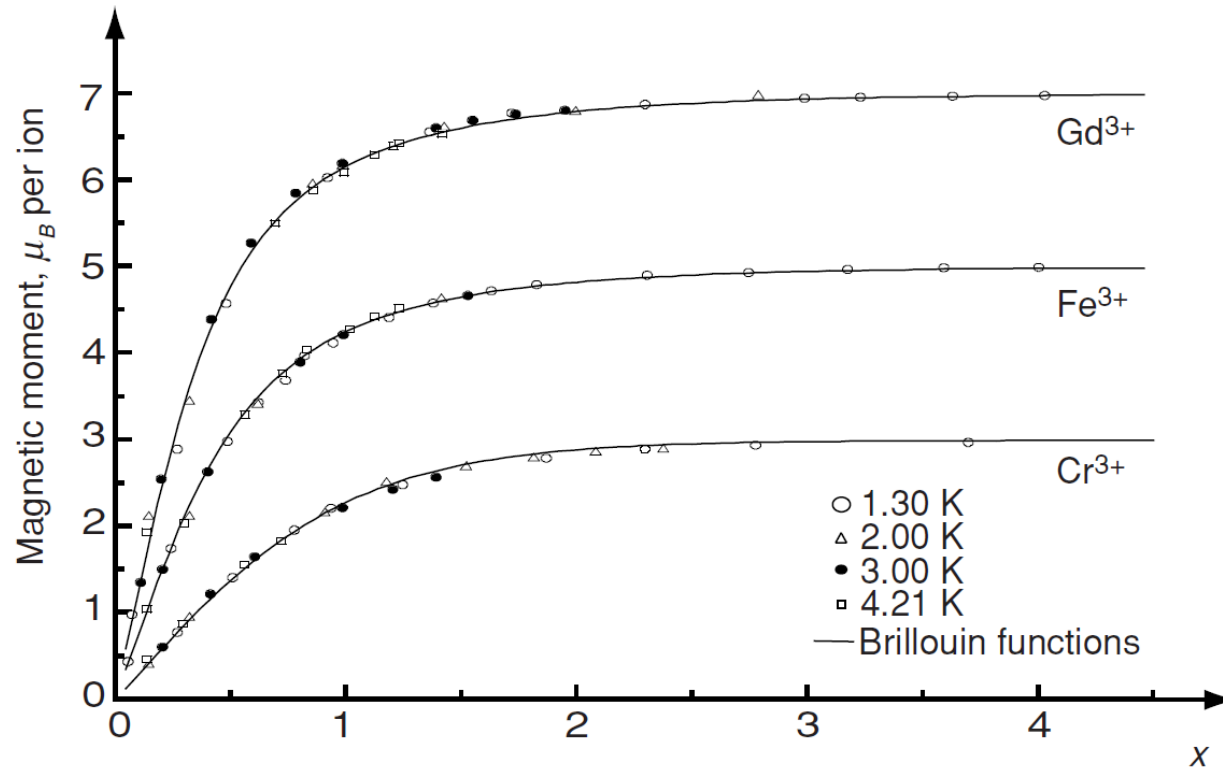
- Para  $J = 1/2$  e  $g = 2$



- $\bar{\mathcal{B}}_{1/2}(x) = \tanh x$

$$x = \frac{\mu_0 \cdot g_J \cdot \mu_B \cdot J \cdot H}{k_B T}$$

Magnetização reduzida curvas para três sais paramagnéticos, em comparação com as previsões da teoria Brillouin . (W.E Henry, Phys. Rev. 88, 559 (1952))



$$x = \frac{\mu_0 \cdot g_J \cdot \mu_B \cdot J \cdot H}{k_B T}$$

$$M = M_0 \left\{ \frac{2J+1}{2J} \coth \frac{2J+1}{2J} x - \frac{1}{2J} \coth \frac{x}{2J} \right\}$$

# Comparação

## Langevin

$$M = N \cdot m_0 \cdot \left[ \coth gs - \frac{1}{s} \right]$$

$$M_0 = N \cdot m_0$$

$$s = \frac{m_0 \cdot B}{k_B T}$$

## Brillouin

$$M = M_0 \left\{ \frac{2J+1}{2J} \coth \frac{2J+1}{2J} x - \frac{1}{2J} \coth \frac{x}{2J} \right\}$$

$$M_0 = N \cdot g_J \cdot \mu_B \cdot J$$

$m_0$

$$x = \frac{\mu_0 g_J \mu_B J H}{k_B T}$$

$B$