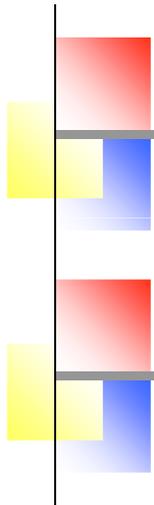


Universidade Federal Fluminense
Instituto de Física
Física IV



Física Atômica
Cap. 42

Daniel

Niterói, 08 de Julho de 2013

Relembrando!!

Capítulo 41 aprendemos como usar a mecânica quântica (Eq. Schrodinger)

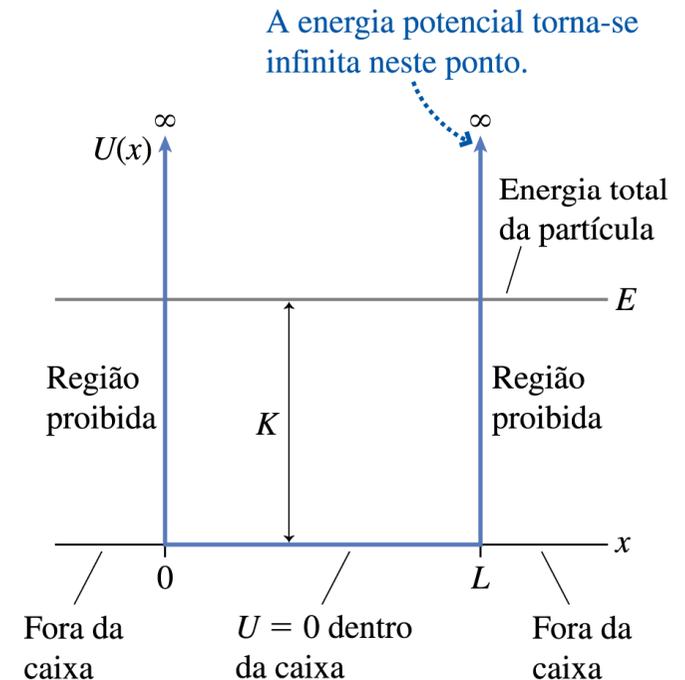
Partícula em uma caixa (paredes infinitas de potencial)

$$1) \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]\psi(x)$$

$$2) \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) \quad U(x) = 0$$

3) Resolver a equação diferencial (ou chutar uma solução)

$$\psi(x) = A \sin(\beta x) \quad \text{e} \quad \psi(x) = B \cos(\beta x)$$



Relembrando!!

Capítulo 41 aprendemos como usar a mecânica quântica (Eq. Schrodinger)

Partícula em uma caixa (paredes infinitas de potencial

4) Aplicar as condições de contorno

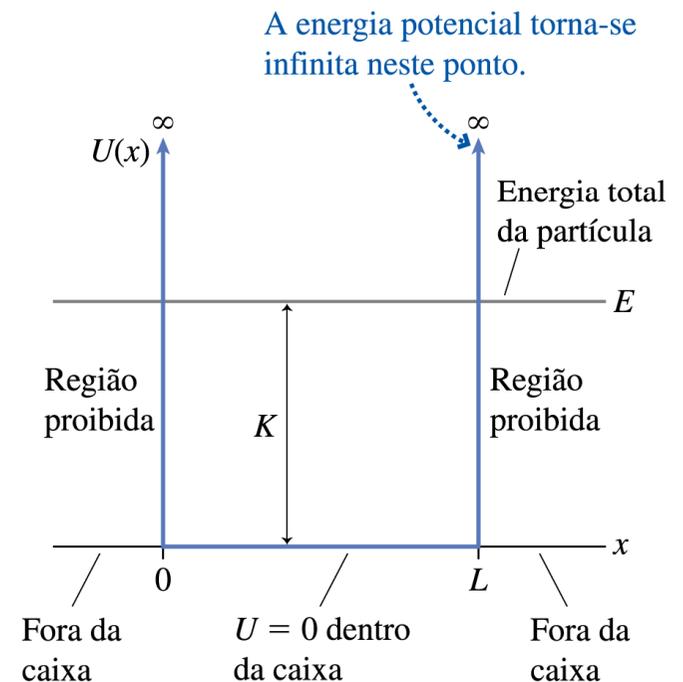
$$\psi(x = 0) = A \sin(\beta \cdot 0) = 0$$

$$\psi(x = 0) = B \cos(\beta \cdot 0) = 0 \quad \longrightarrow \quad B = 0$$

5) Aplicar as condições de contorno

$$\psi(x = L) = A \sin(\beta L) = 0 \quad \beta = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\beta L = n\pi \quad \longrightarrow \quad E_n = n^2 h^2 / 8mL^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

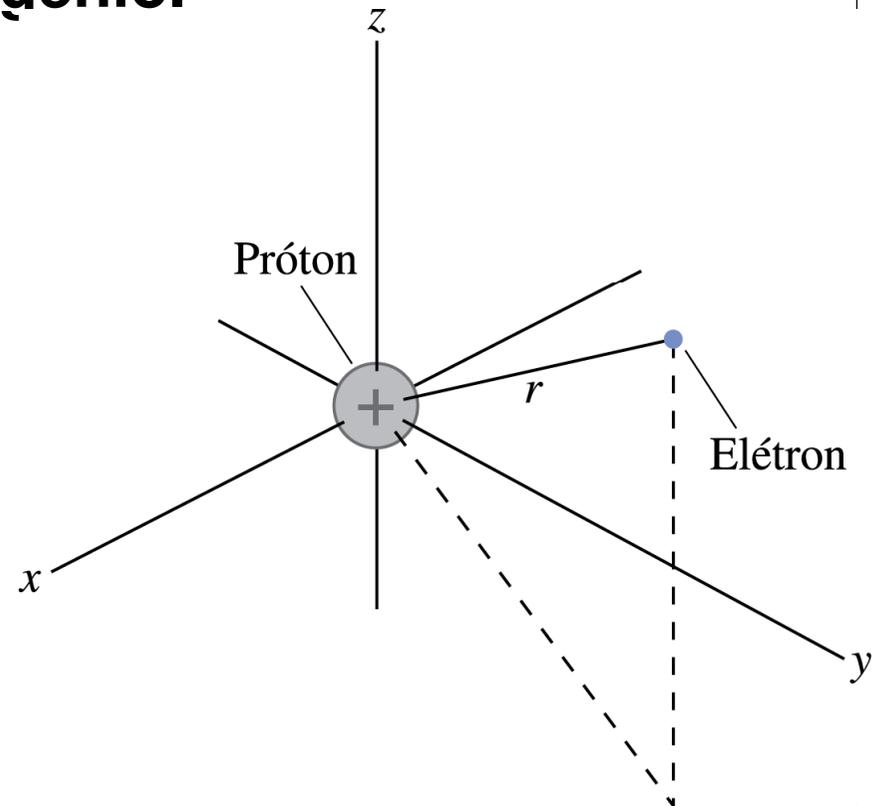


5) A condição de contorno (que confina a partícula) quantiza a Energia.

O átomo de Hidrogênio

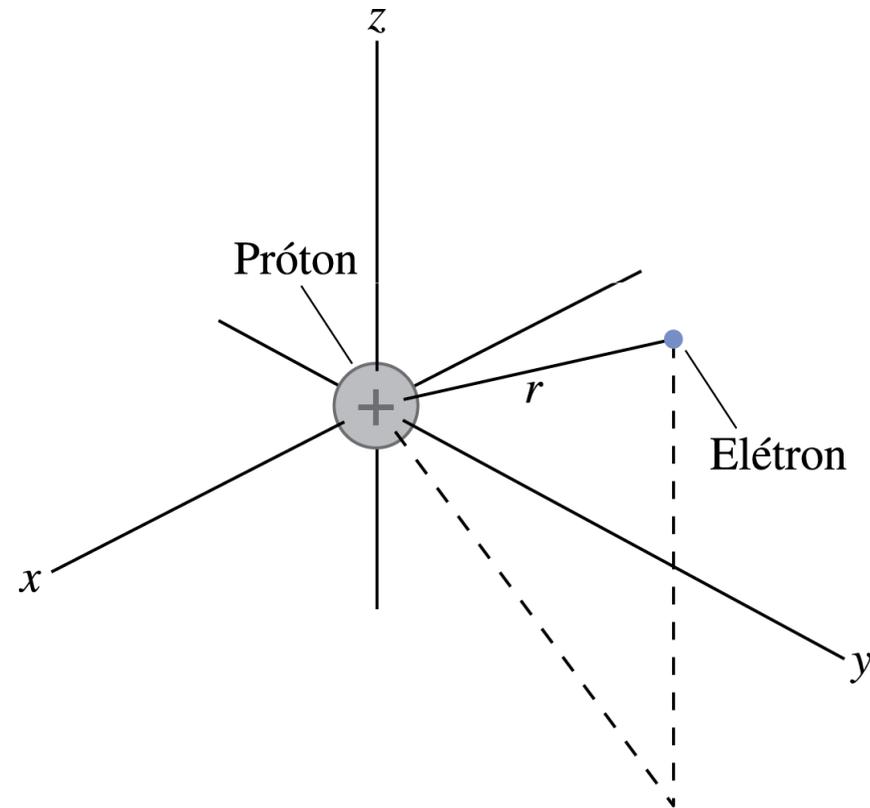
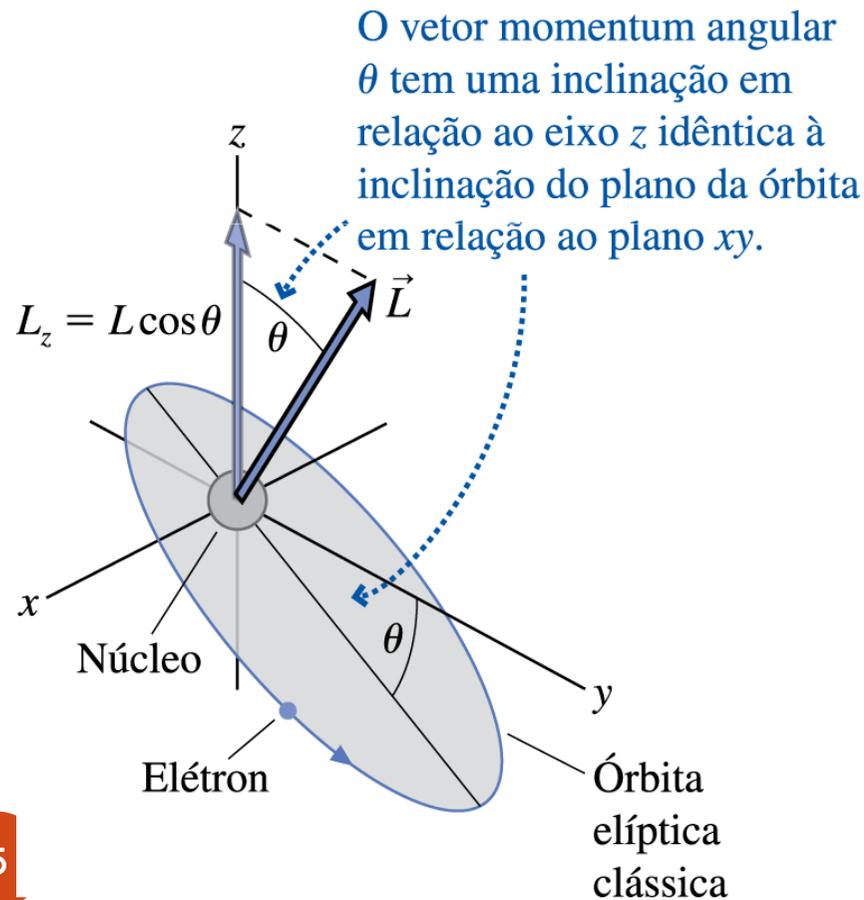
Potencial eletrostática que o elétron está submetido no átomo de hidrogênio.

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$



O átomo de Hidrogênio

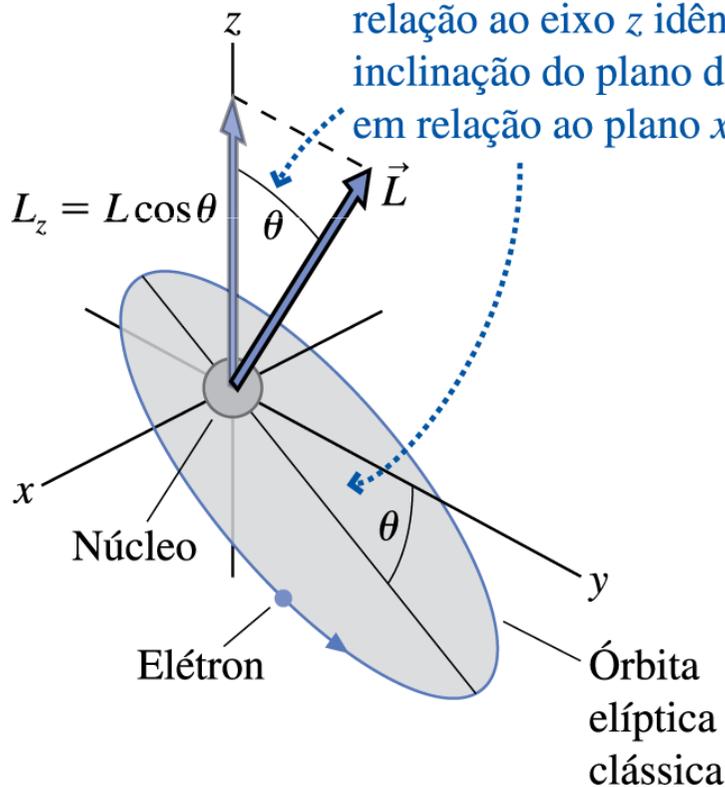
O momento angular é quantizado; exemplo de uma órbita clássica.



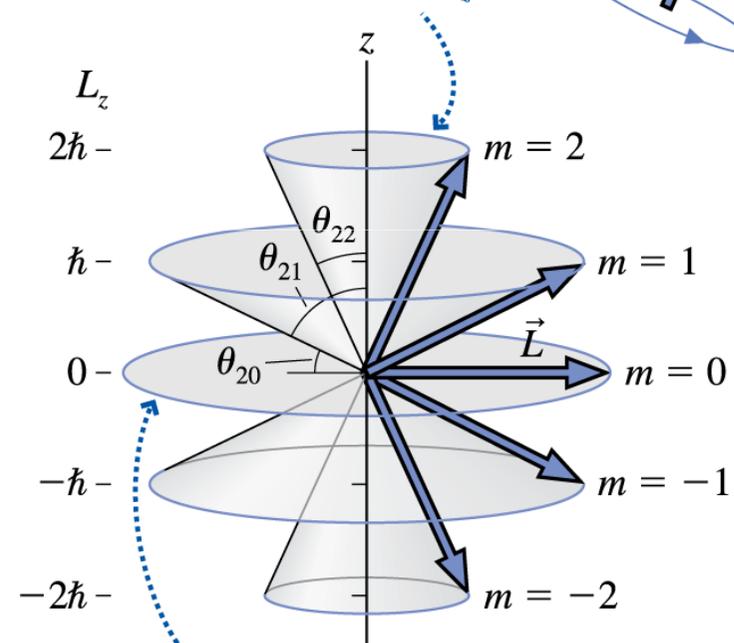
O átomo de Hidrogênio

O momento angular é quantizado; $l = 2$

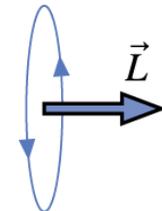
O vetor momentum angular \vec{L} tem uma inclinação em relação ao eixo z idêntica à inclinação do plano da órbita em relação ao plano xy .



Se $m = 2$, \vec{L} situa-se em algum lugar na superfície deste cone com $L_z = 2\hbar$.



Se $m = 0$, \vec{L} situa-se em algum lugar deste disco sobre o plano xy . A órbita clássica associada ao elétron estaria em um plano vertical.



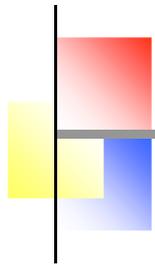
Os níveis de Energia do átomo de Hidrogênio

Só depende de n , porém, para outros átomos depende de n e l

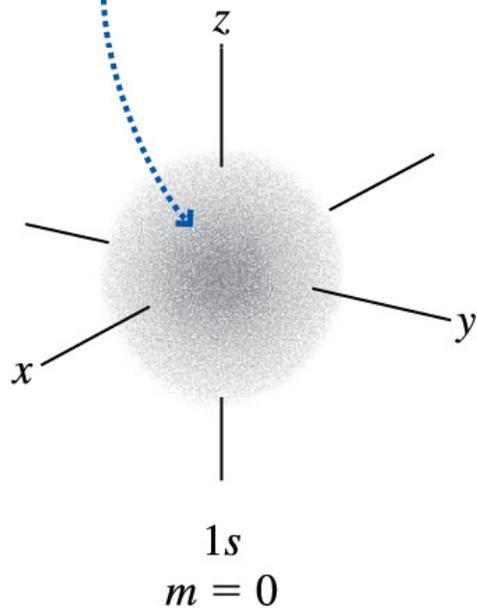
Número quântico l	0	1	2	3	
Símbolo	s	p	d	f	
n	$E = 0 \text{ eV}$	----- Limite de ionização -----			
4	$-0,85 \text{ eV}$	<u>4s</u>	<u>4p</u>	<u>4d</u>	<u>4f</u>
3	$-1,51 \text{ eV}$	<u>3s</u>	<u>3p</u>	<u>3d</u>	
2	$-3,40 \text{ eV}$	<u>2s</u>	<u>2p</u>		
1	$-13,60 \text{ eV}$	<u>1s</u>			

Estado fundamental

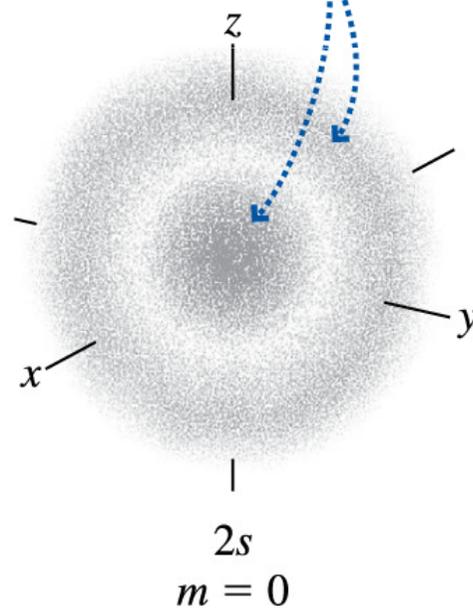
Átomo de Hidrogênio



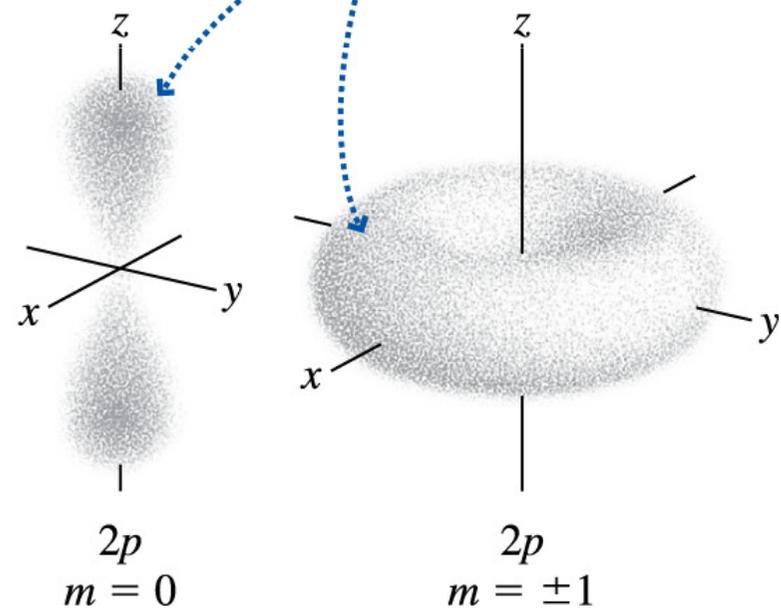
Um elétron no estado $1s$ tem maior probabilidade de ser encontrado na origem.



Um elétron no estado $2s$ tem maior probabilidade de ser encontrado tanto na origem quanto em uma camada esférica que a circunda.

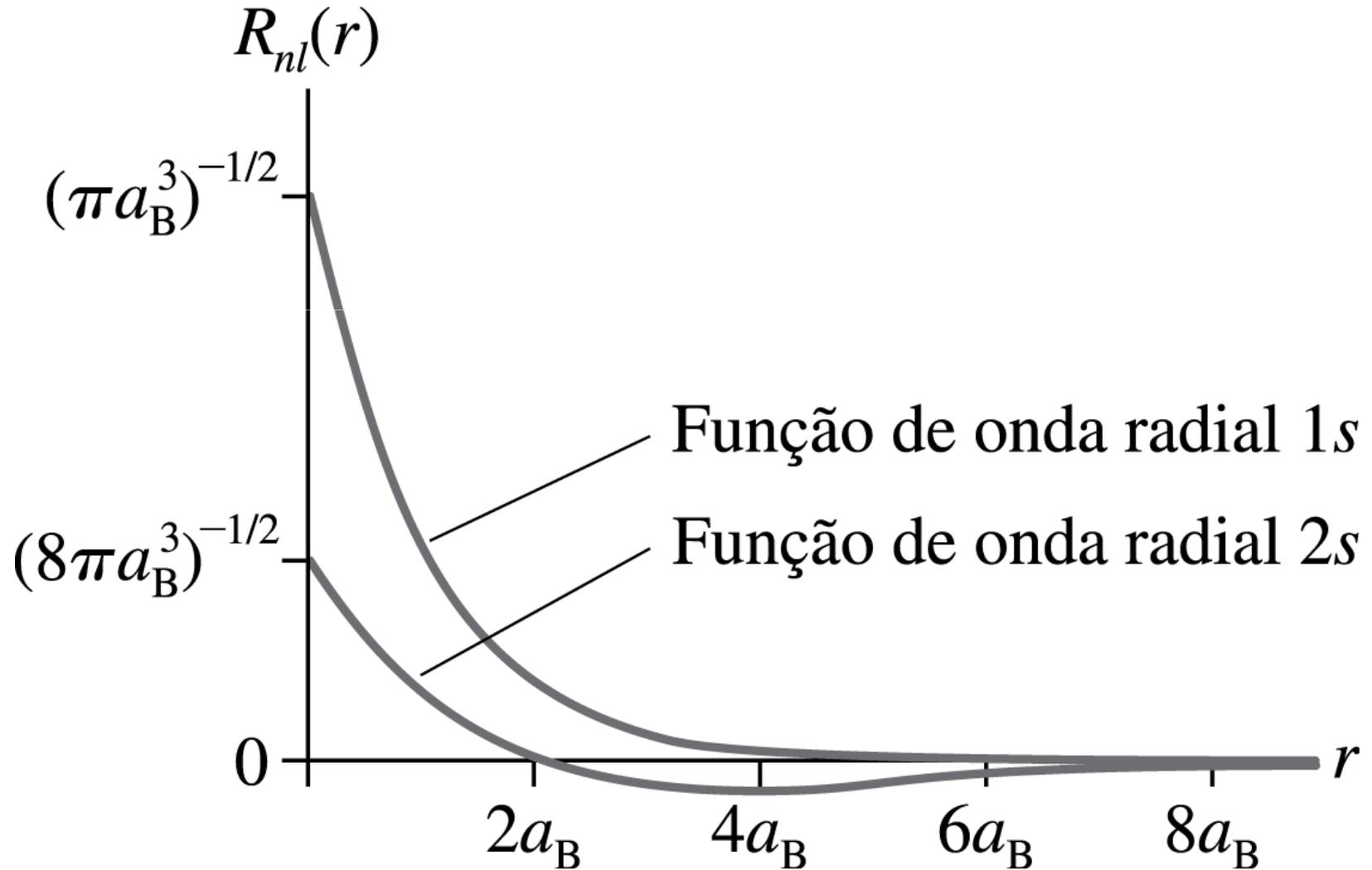


A probabilidade de encontrar elétrons p é maior em algumas direções do que em outras.



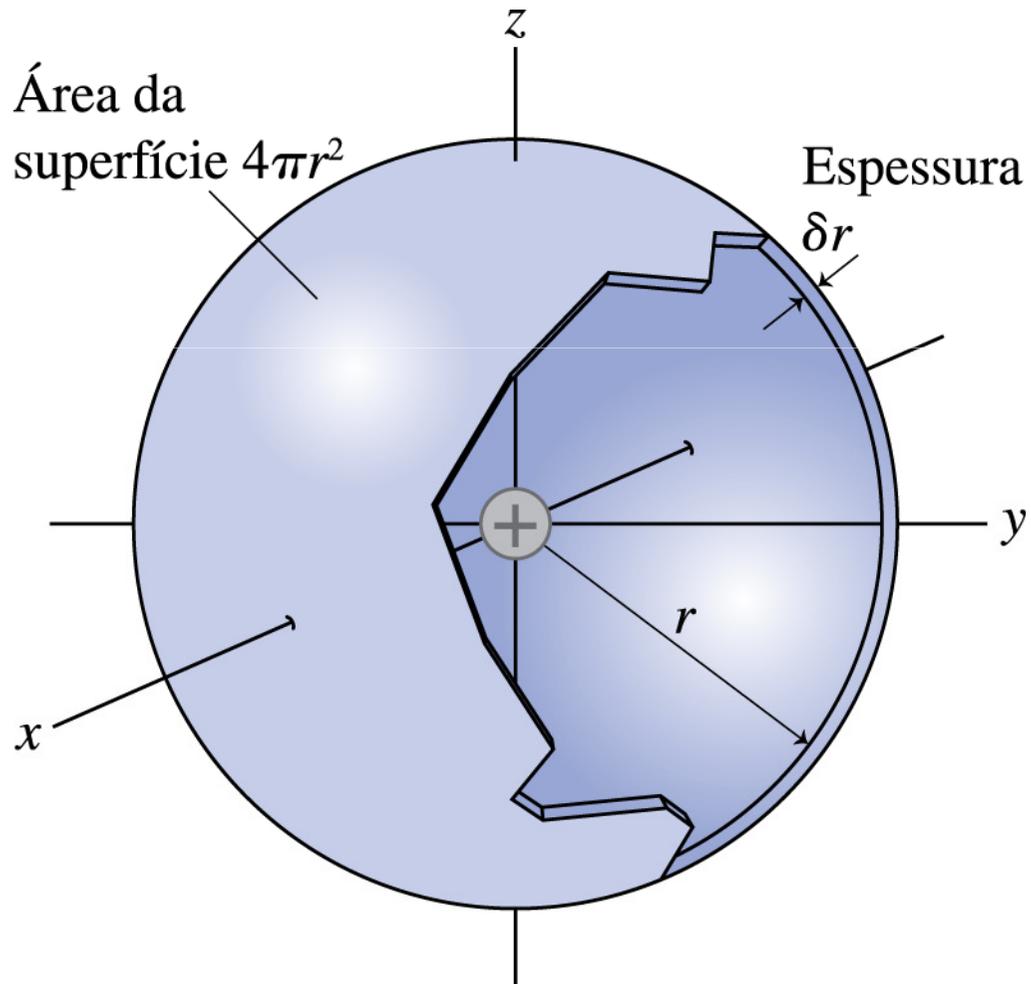
Átomo de Hidrogênio

Funções de onda para $n = 1$ e $l = 0$ (1s) e $n = 2$, $l = 0$ (2s)

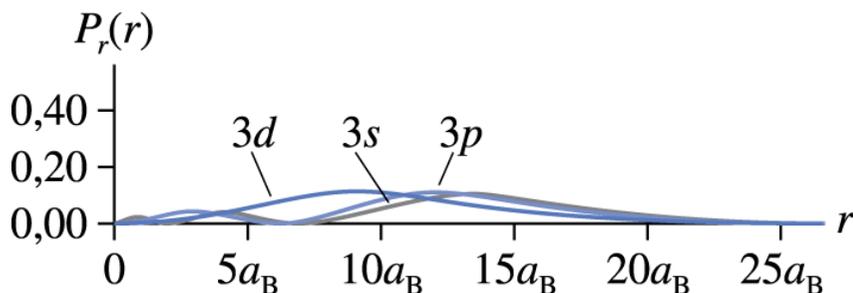
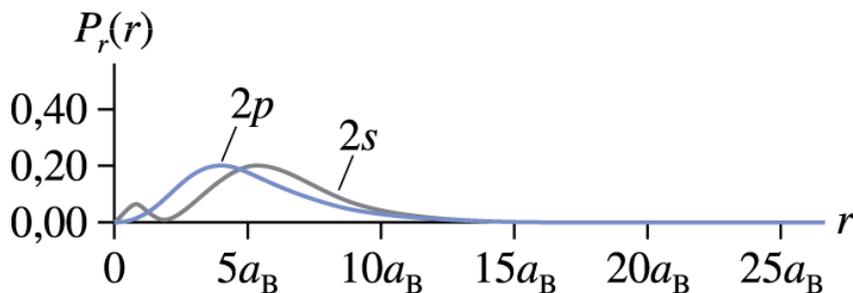
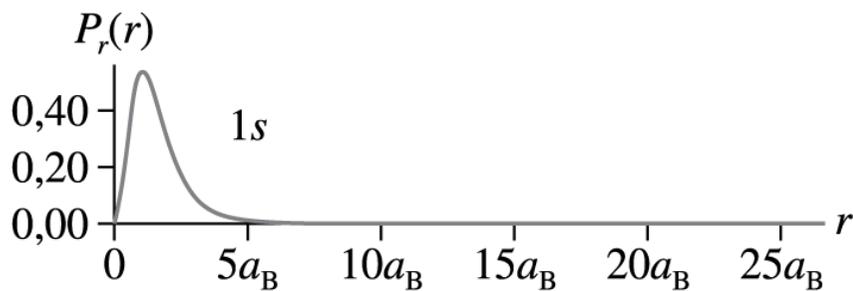
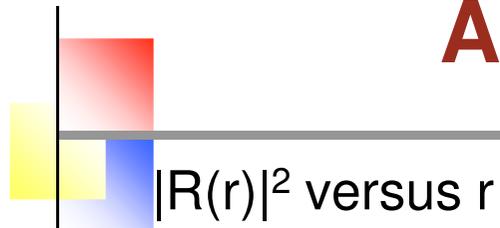


Átomo de Hidrogênio

Prob (com δV centrado em r) = $|R(r)|^2 \delta V$



Átomo de Hidrogênio



- 1) Máximos de 1s, 2p e 3d seguem $r_{\text{pico}} = n^2 a_B$
- 2) máximos para estados com $L =$ máximos ($l = n-1$)
- 3) 3s tem um pico próximo ao núcleo e um mais distante (órbita elíptica).

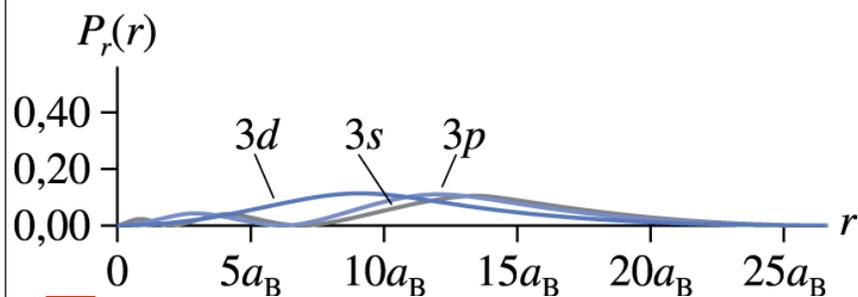
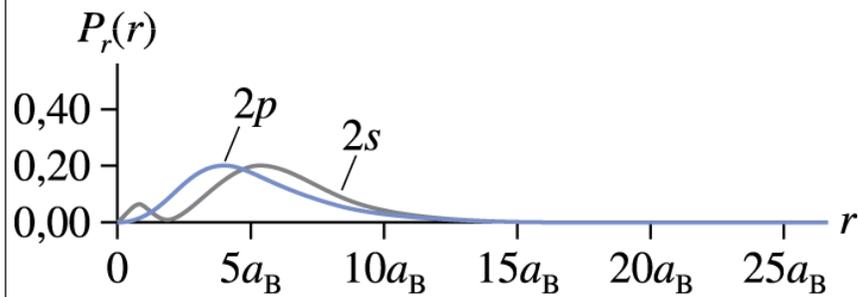
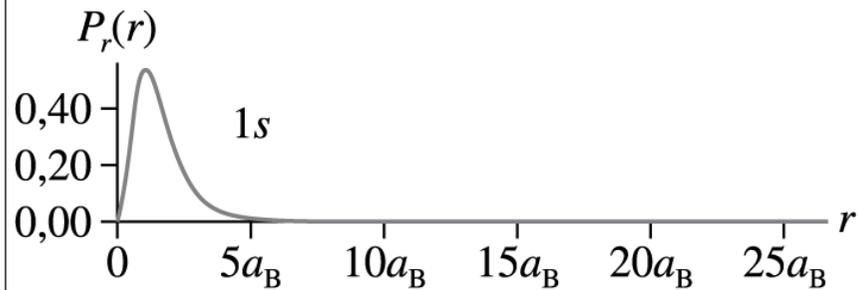
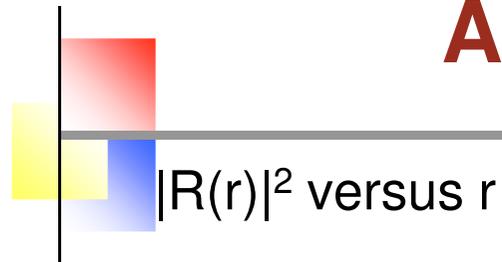
A órbita circular possui o maior momentum angular. O elétron mantém-se a uma distância constante do núcleo.

Órbita é uma analogia com a física clássica, ninguém está orbitando, o elétron tem um comportamento ondulatório, é uma \oplus onda espalhada no espaço.

Ambas as órbitas têm a mesma energia total E .

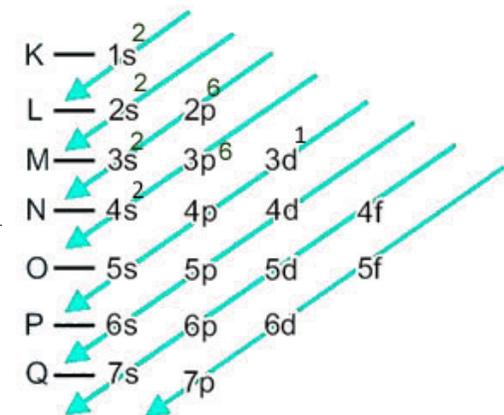
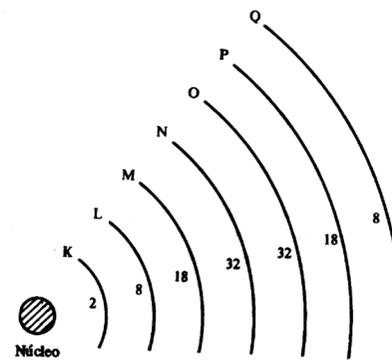
Em comparação à órbita circular, a órbita elíptica possui menor momentum angular. O elétron tanto se afasta quanto se aproxima do núcleo.

Átomo de Hidrogênio



- 1) Para $n = 1$; a_B (o máximo)
- 2) Para $n = 2$; entre $3a_B$ e $7 a_B$
- 3) Para $n = 3$; entre $8 a_B$ e $15a_B$

Isso é a base do modelo de camadas do átomo usado na química

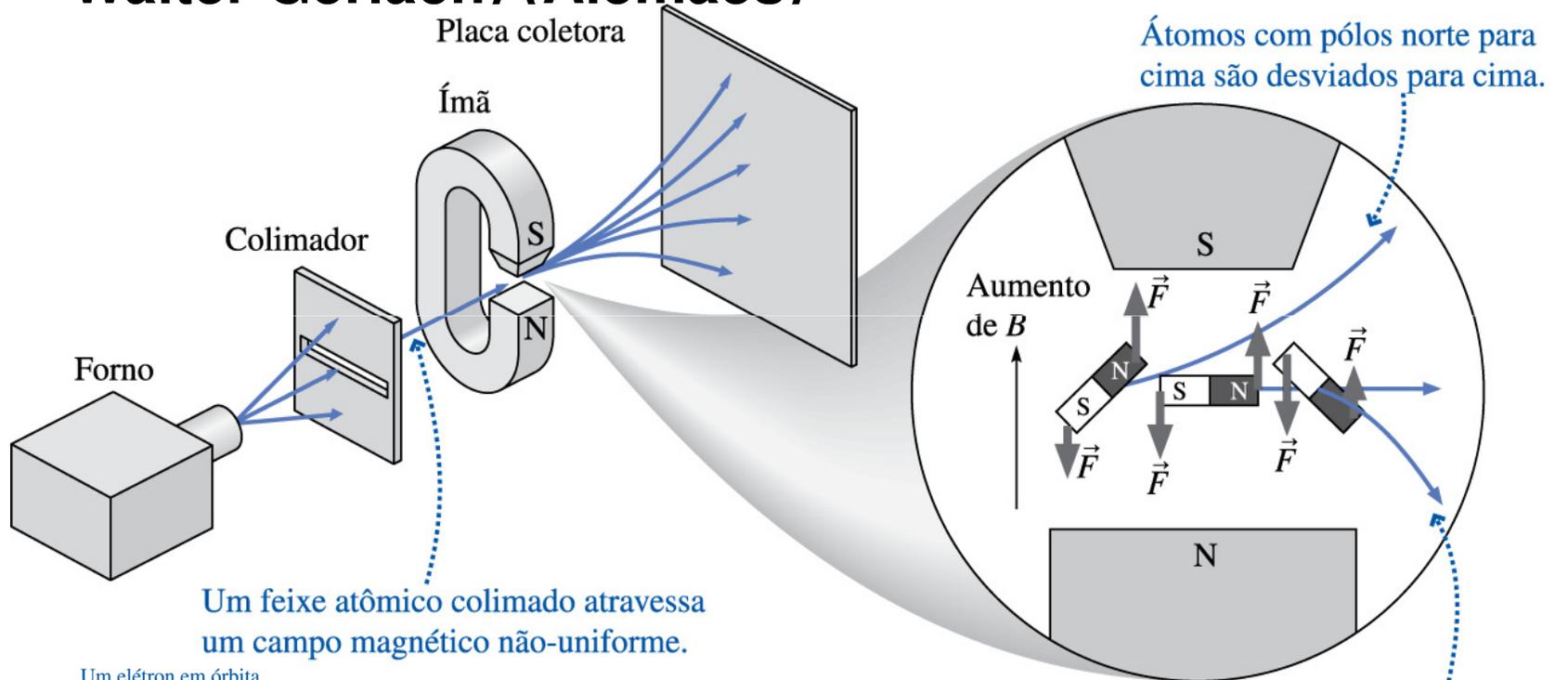


Átomo de Hidrogênio

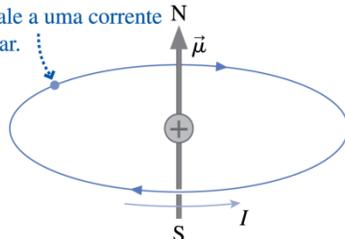
Ex. 42.3 Mostre que um elétron no estado 2p tem maior probabilidade de ser encontrado em $r = 4a_B$.

O spin do elétron

Experimento de Stern-Gerlach (Otto Stern e Walter Gerlach) (Alemães)



Um elétron em órbita equivale a uma corrente circular.

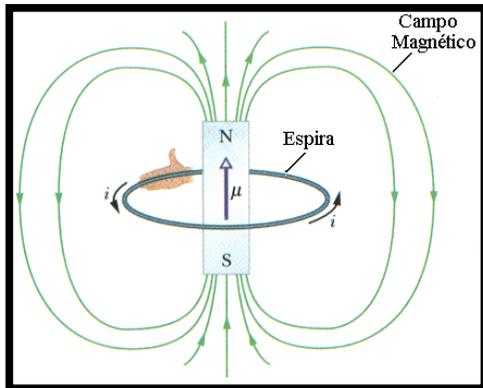
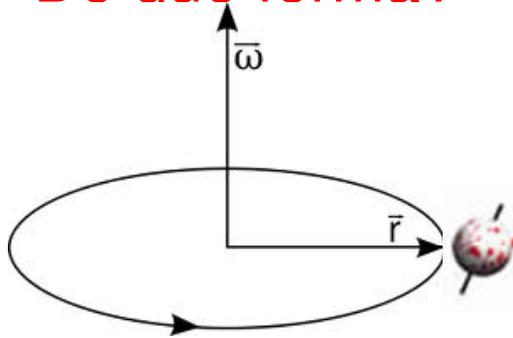


Uma corrente circular gera um momento magnético com pólos magnéticos norte e sul.

Momento magnético

Momento Magnético Orbital

- De que forma?



L é quantizado: $L = \hbar, 2\hbar, 3\hbar \dots$

$$h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

Momento de dipolo Magnético

$$\vec{\mu} = I\vec{A}$$

$$I = \frac{dq}{dt} = -\frac{e}{T}$$

$$\mu = I\pi r^2 = -\frac{e\omega r^2}{2}$$

Momento angular

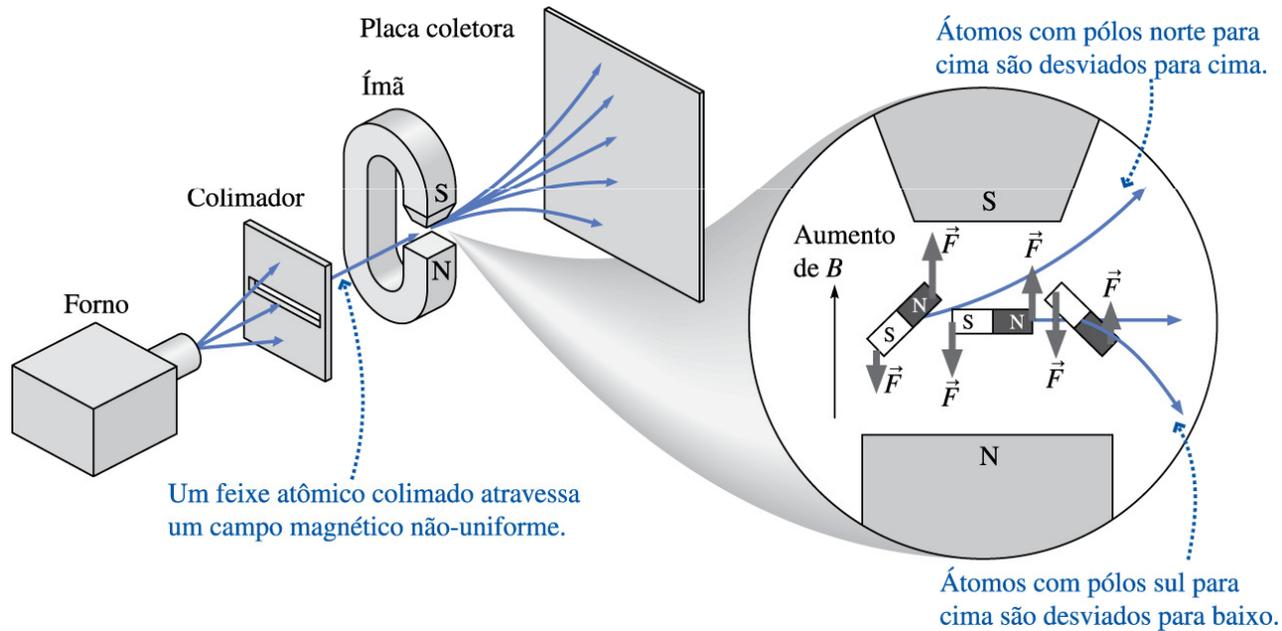
$$|\vec{L}| = |\vec{r} \times \vec{p}| = m_e \omega r^2$$

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$$

$$\vec{\mu} = -\mu_B \vec{L}$$

O spin do elétron

Experimento de Stern-Gerlach: O que seria esperado?



(a) Placa coletora

Sem campo magnético: não ocorre deflexão; todos os átomos atingem o centro.

(b)

Átomos clássicos: L_z assume valores em um intervalo contínuo; logo, há uma gama contínua de desvios

(c)

Átomos quânticos com $l = 1$: há três valores possíveis de L_z e, conseqüentemente, três grupos de átomos.

$m = 1$

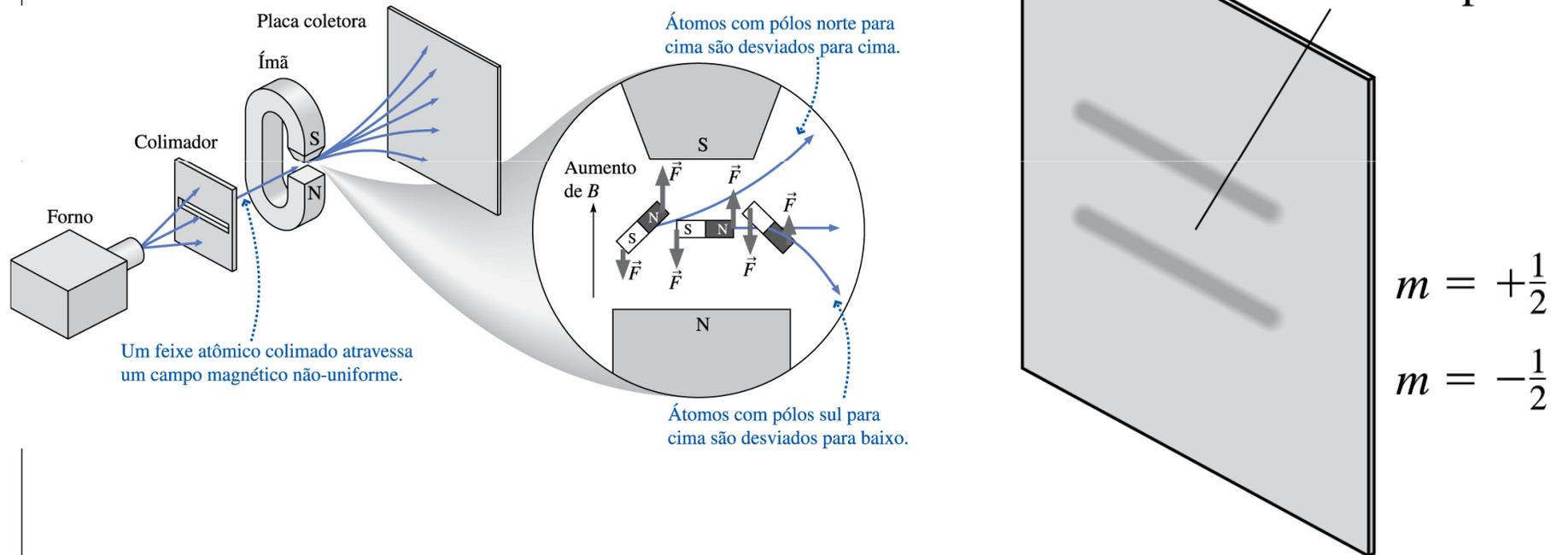
$m = 0$

$m = -1$

The figure shows three detector plates (Placa coletora) labeled (a), (b), and (c). Plate (a) shows a single horizontal line representing a single spot of atoms at the center, with the text 'Sem campo magnético: não ocorre deflexão; todos os átomos atingem o centro.' Plate (b) shows a vertical smear of atoms, with the text 'Átomos clássicos: L_z assume valores em um intervalo contínuo; logo, há uma gama contínua de desvios'. Plate (c) shows three distinct horizontal lines representing discrete spots of atoms, with the text 'Átomos quânticos com $l = 1$: há três valores possíveis de L_z e, conseqüentemente, três grupos de átomos.' The lines are labeled with their respective magnetic quantum numbers: $m = 1$, $m = 0$, and $m = -1$.

O spin do elétron

Experimento de Stern-Gerlach: Para o Hidrogênio observou-se duas linhas e não uma única linha ($1s, l = 0$) ou um número ímpar $(2l + 1)$



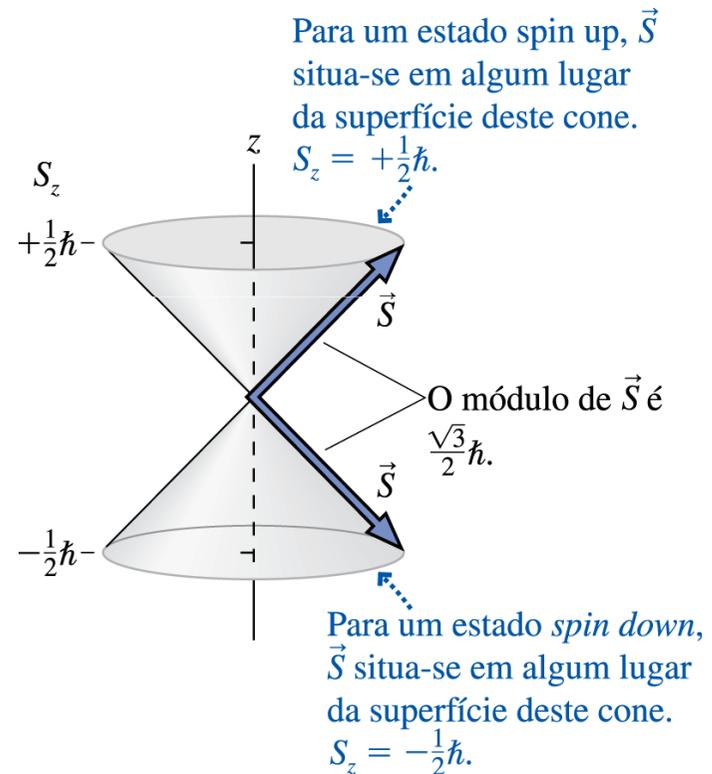
Parece que há um outro momento angular (outro momento magnético), além do orbital. Sugeriu-se que há um momento magnético *intrínseco* (Spin).

O spin do elétron

O momento angular de spin S possui uma componente z (S_z) onde

$S_z = m_s \hbar$, onde m_s número quântico de spin ($m_s = +1/2$ e $m_s = -1/2$).

O spin do elétron é uma propriedade quântica intrínseca dele, sem análogo clássico.



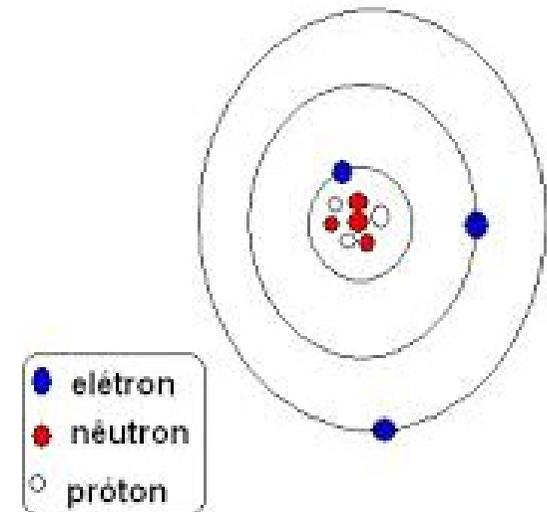
Assim, precisamos de quatro números quânticos para caracterizar os estado estacionários de um átomo (n, l, m, m_s)

Átomos multieletrônicos

Além da interação dos elétrons com o núcleo, agora teremos a interação elétron-elétron

$$U(r_i) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + U_{elet}(r_i)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]\psi(x)$$

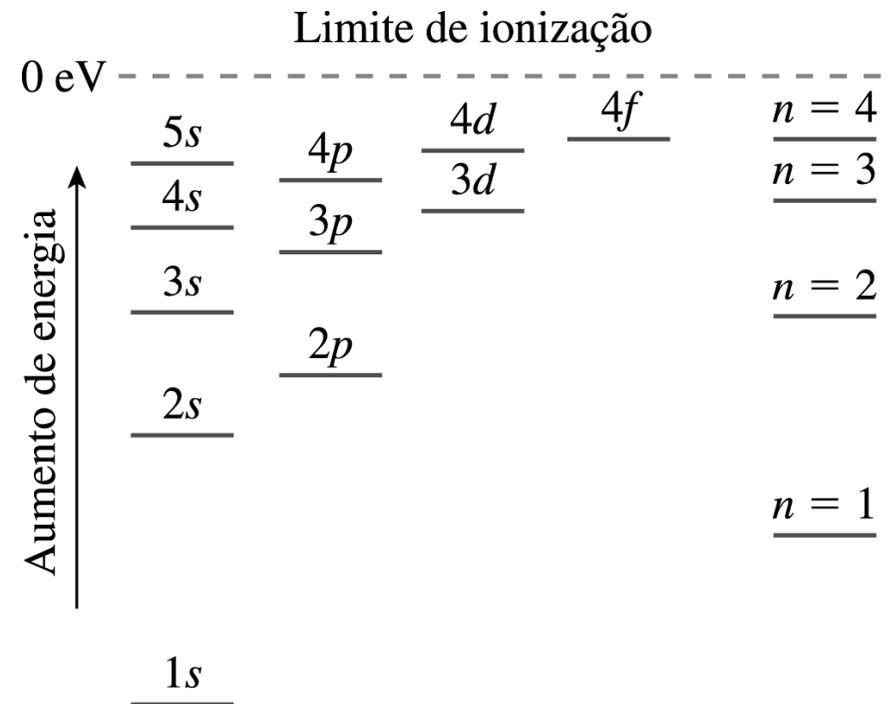
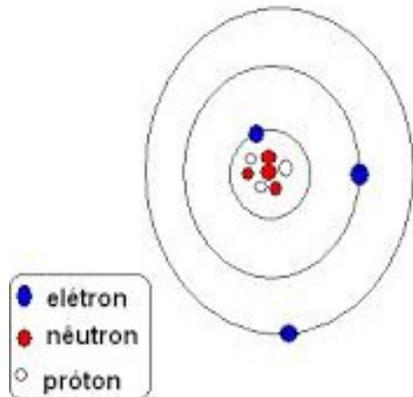


Átomos multieletrônicos

Além da interação dos elétrons com o núcleo, agora teremos a interação elétron-elétron

$$U(r_i) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + U_{elet}(r_i)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]\psi(x)$$



Átomo multieletrônico Hidrogênio

Para átomos multieletrônicos a energia depende dos números quânticos; n e l.

Átomos multieletrônicos

Princípio de exclusão de Pauli. (Wolfgang Pauli, Austríaco): **não pode haver dois elétrons com o mesmo conjunto de números quânticos (n, l, m, m_s)**

(a) Estado fundamental do He

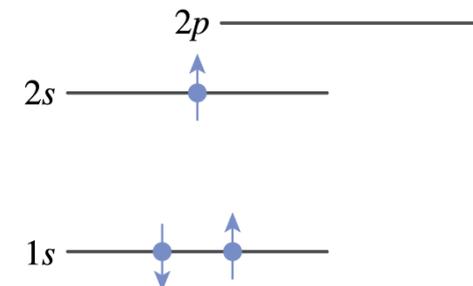
As linhas horizontais representam as energias permitidas.

Cada círculo representa um elétron naquele nível de energia.

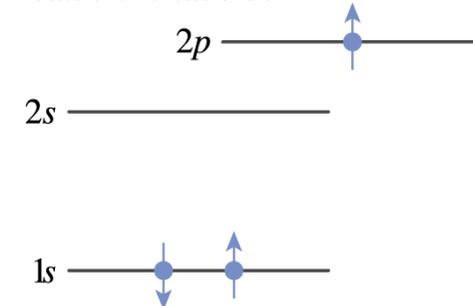
(b) Estado excitado do He

A flecha indica se o elétron possui *spin up* ($m_s = +\frac{1}{2}$) ou *spin down* ($m_s = -\frac{1}{2}$).

(a) Estado fundamental do Li

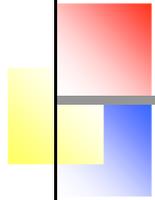


(b) Estado excitado do Li



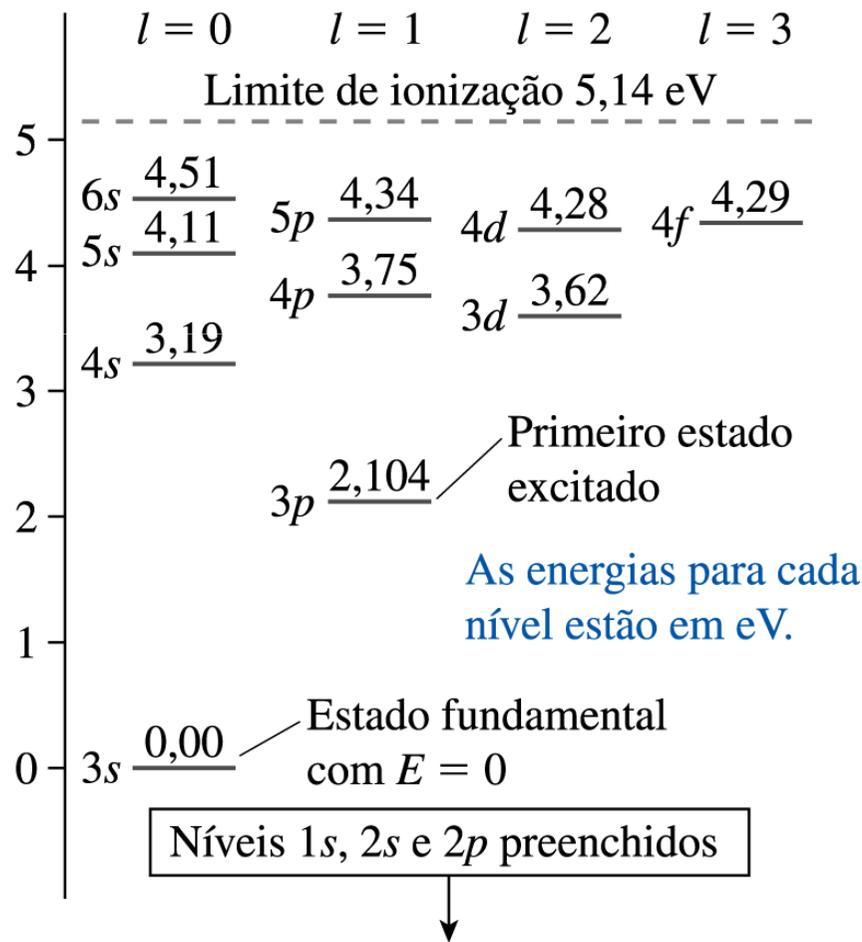
He no estado fundamental ($1s^2$ – camada fechada) , por ser $l = 0$ e dois e⁻ com spin up e spin down, não possui momento magnético líquido – não será atraído por um ímã (nem defletido no experimento de Stern-Gerlach).

Estados excitados e espectros



Átomos multieletrônicos:

Energia (eV)



Na ($Z = 11$, elétrons) = $1s^2, 2s^2, 2s^6, 3s^1$ Ne ($z = 10$)

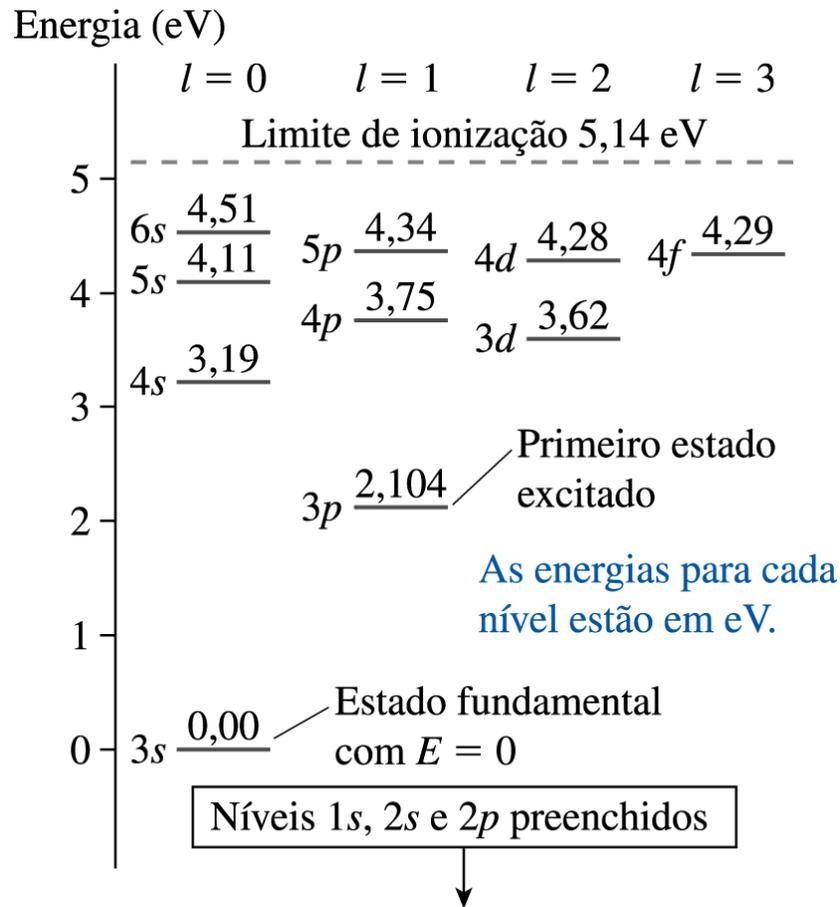
Estado fundamental do sódio (Na)
[Ne]3s

Primeiro estado excitado:
[Ne]3p

Observe que o estado 3s foi considerado com $E = 0$. Apesar de $E \propto -1/n^2$. Lembrar que é uma convenção.

Estados excitados e espectros

Átomos multieletrônicos:



Observe que o estado 3s foi considerado com $E = 0$. Apesar de $E \propto -1/n^2$. Lembrar que é uma convenção.

$$f = \frac{\Delta E_{\text{átomo}}}{h} = \frac{E_2 - E_1}{h}$$

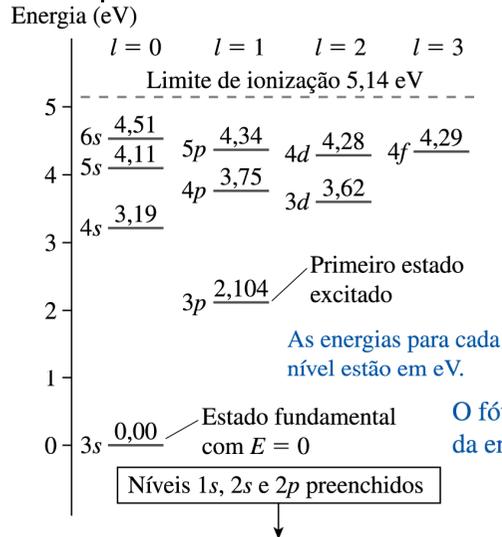
$$\lambda = \frac{c}{f} = \frac{hc}{\Delta E_{\text{átomo}}}$$

Qualquer transição é possível??

Resposta: Não

Estados excitados e espectros

Átomos multieletrônicos:



Observe que o estado 3s foi considerado com $E = 0$. Apesar de $E \propto -1/n^2$. Lembrar que é uma convenção.

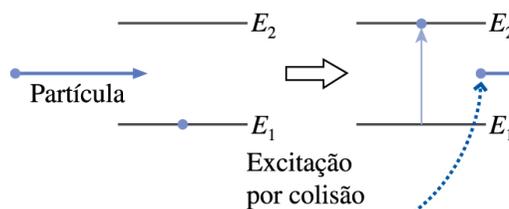
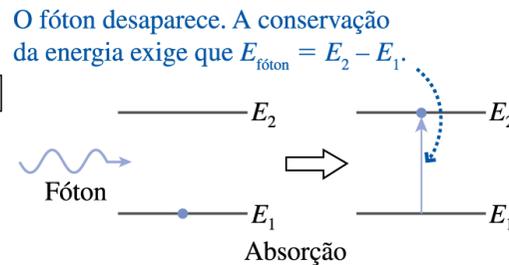
$$f = \frac{\Delta E_{\text{átomo}}}{h} = \frac{E_2 - E_1}{h}$$

Qualquer transição é possível??

Resposta: Não

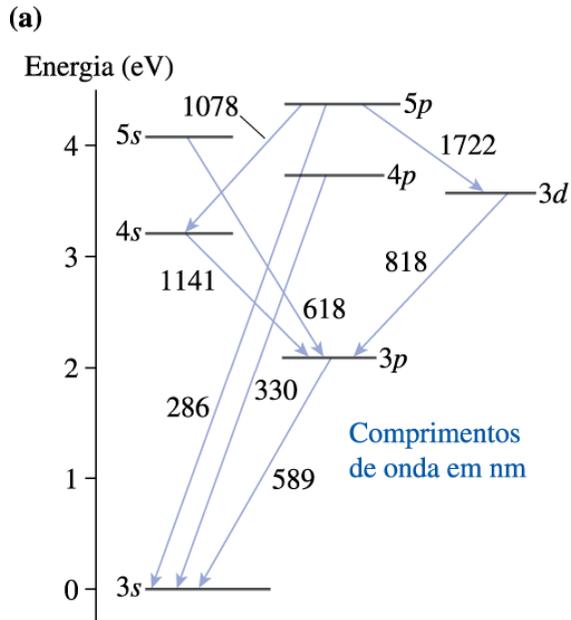
Regra de seleção para emissão ou absorção:

$$\Delta l = |l_2 - l_1| = 1$$



Estados excitados e espectros

Átomos multieletrônicos:



Observe que o estado 3s foi considerado com $E = 0$. Apesar de $E \propto -1/n^2$. Lembrar que é uma convenção.

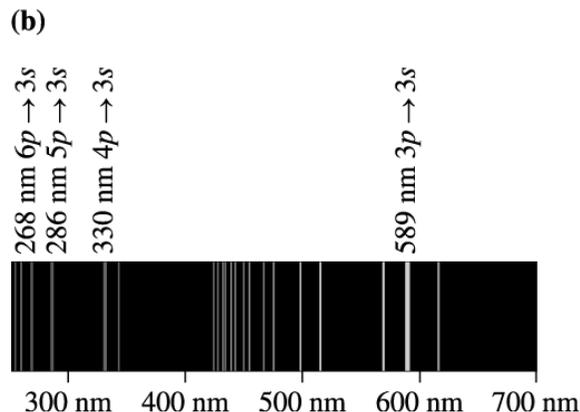
$$f = \frac{\Delta E_{\text{átomo}}}{h} = \frac{E_2 - E_1}{h}$$

Qualquer transição é possível??

Resposta: Não

Regra de seleção para emissão ou absorção:

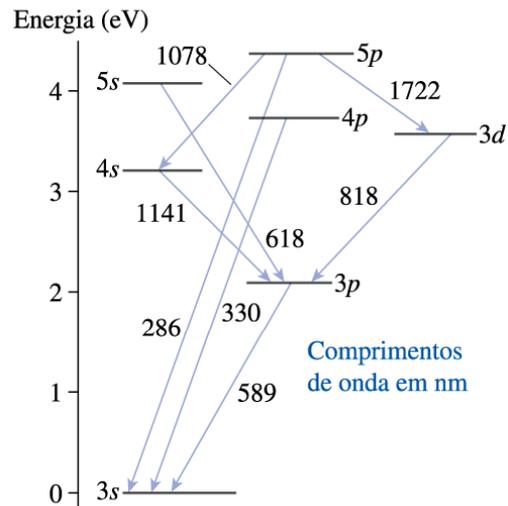
$$\Delta l = |l_2 - l_1| = 1$$



Tempos de vida médio

Átomos multieletrônicos:

(a)



Equação de relaxação:

$$N_{exc} = N_0 e^{-t/\tau}$$

$$\tau = \frac{1}{r}$$

Número de fótons
(milhares)



τ - Tempo de vida médio do estado excitado (s)

r - taxa de relaxação (s^{-1})

Tempo de vida: desde ms até ns.