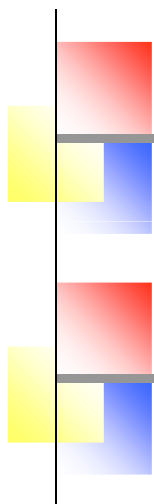


Universidade Federal Fluminense
Instituto de Física
Física IV



Física Atômica
Cap. 42

Daniel

Niterói, 29 de setembro de 2014

Relembrando!!

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

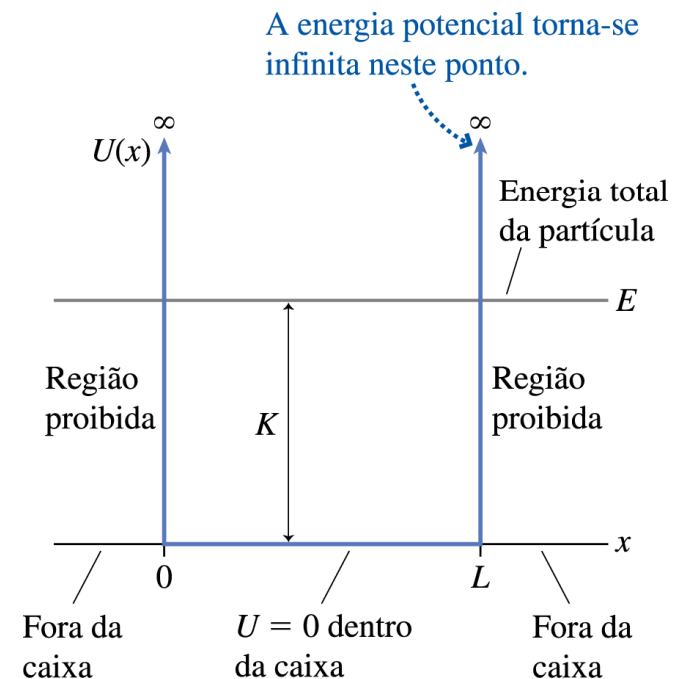
Partícula em uma caixa (paredes infinitas de potencial)

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

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

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

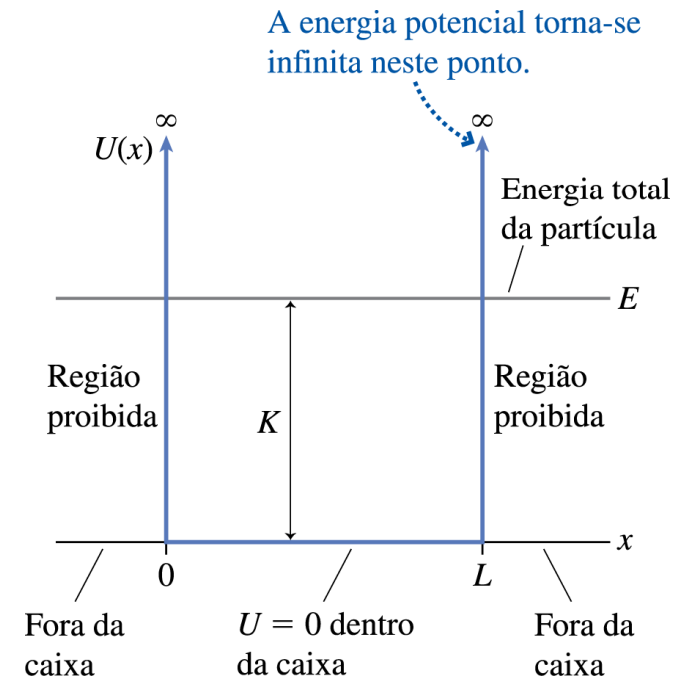
$$\psi(x=0) = A \sin(\beta \cdot 0) = 0$$

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

5) Aplicar as condições de contorno

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

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

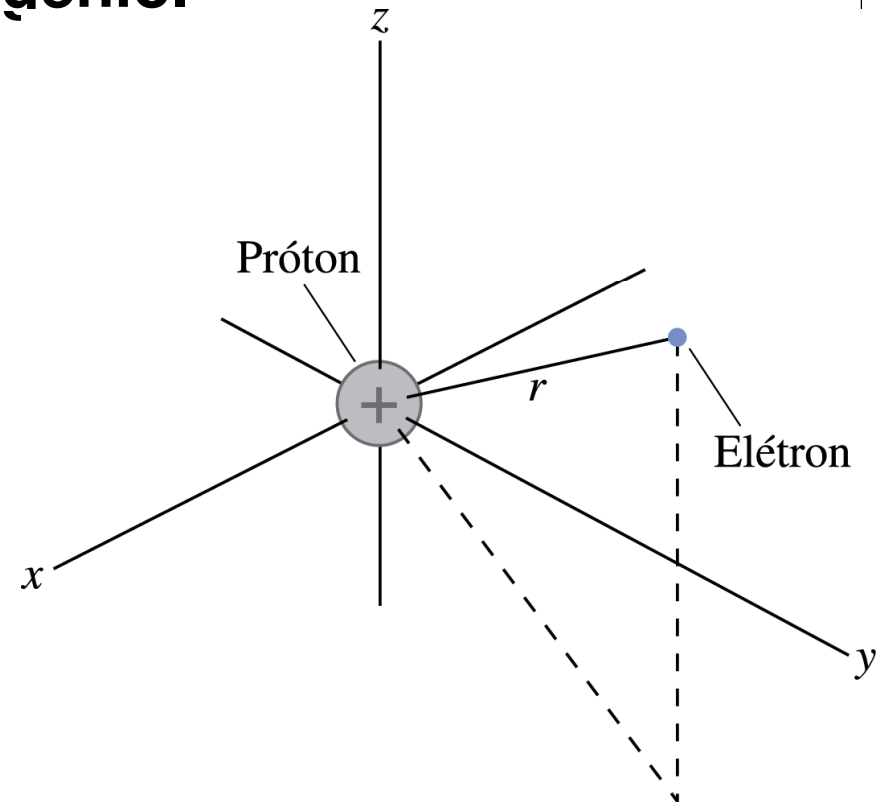


5) A condição de contorno (que confina a partícula) quantiza a Energia.

O átomo de Hidrogênio

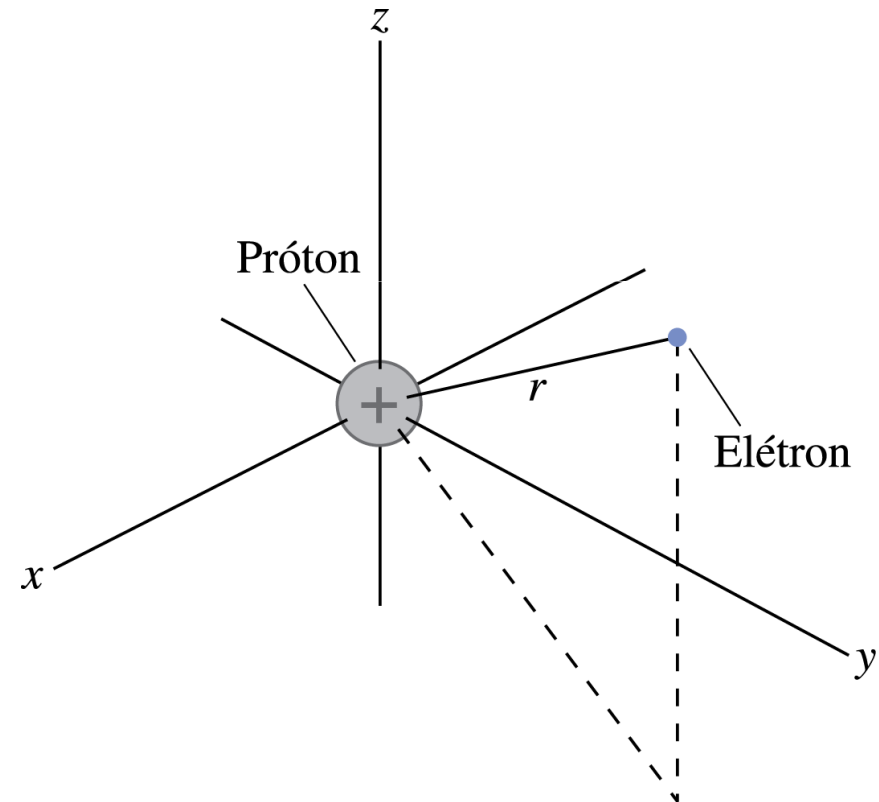
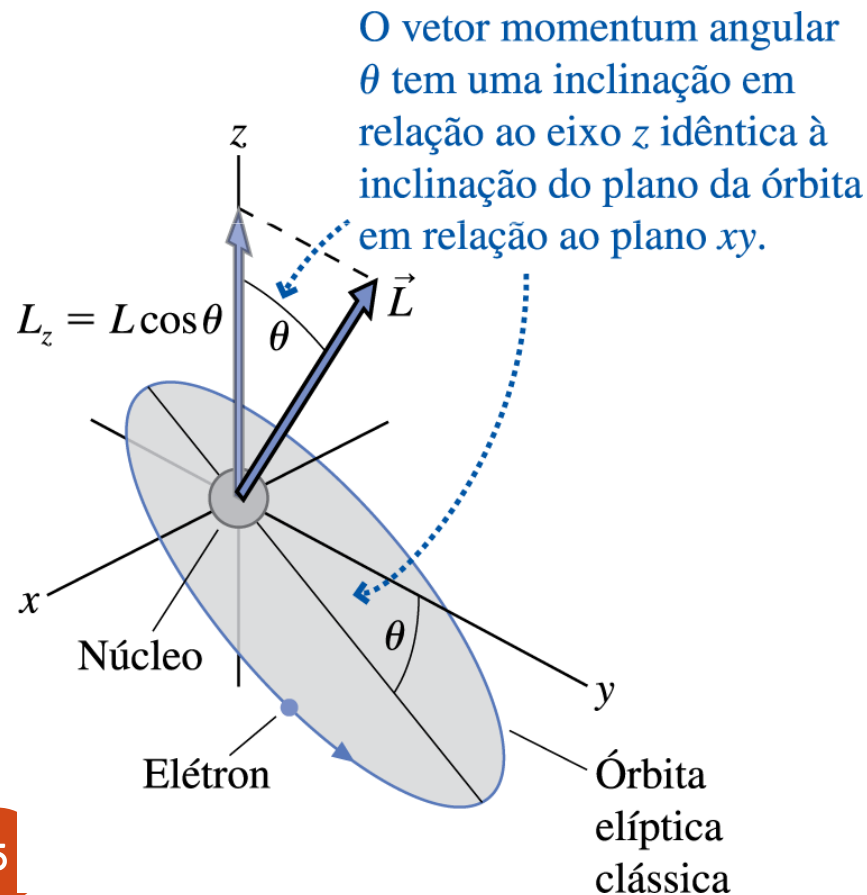
Potencial eletrostática que o elétron está submetido no átomo de hidrogênio.

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



O átomo de Hidrogênio

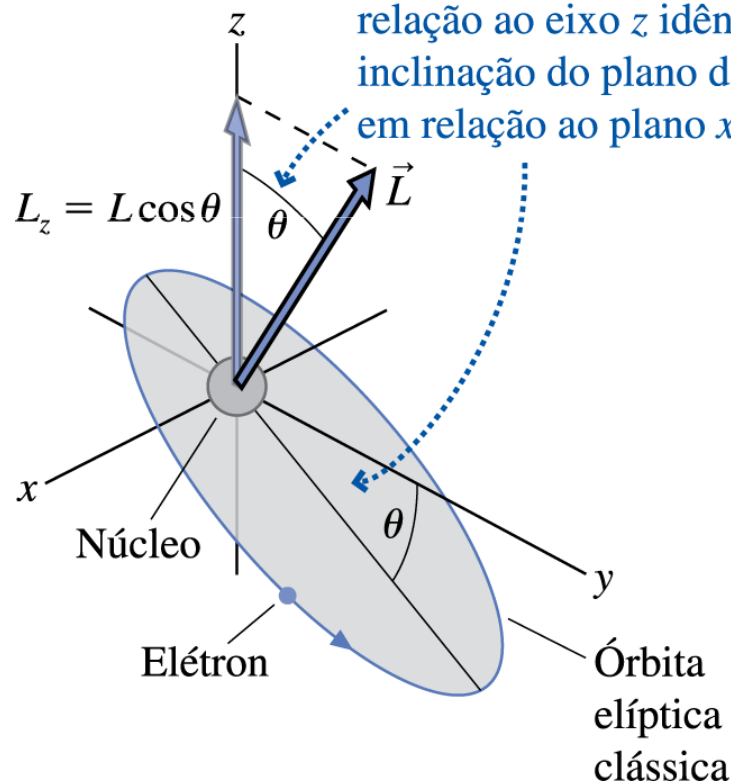
O momento angular é quantizado; exemplo de uma órbita clássica.



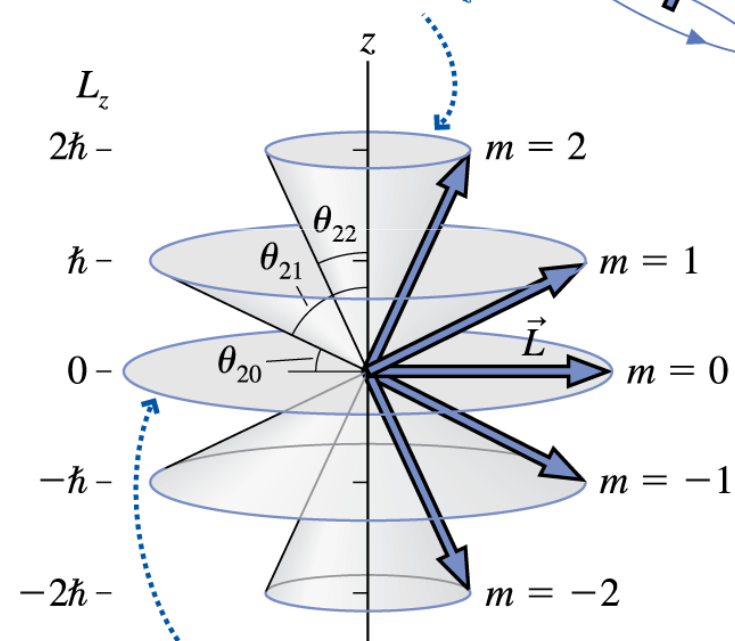
O átomo de Hidrogênio

O momento angular é quantizado; $l = 2$

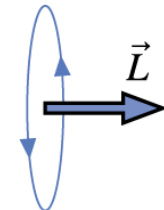
O vetor momentum angular $\vec{L}$ tem uma inclinação em relação ao eixo z idêntica à inclinação do plano da órbita em relação ao plano xy .



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



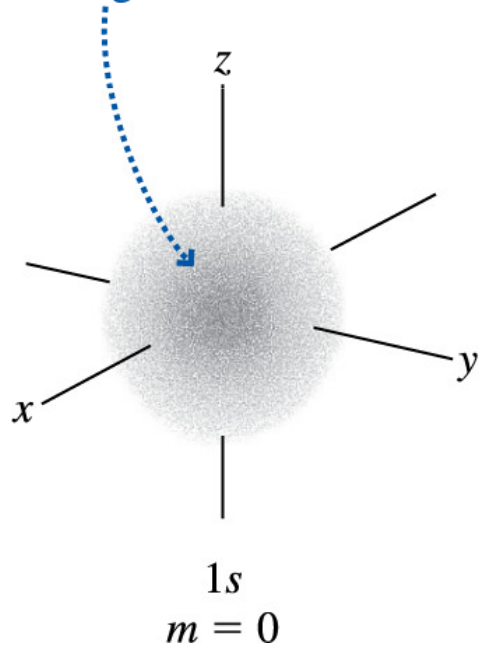
Só depende de n , porém, para outros átomos depende de n e l

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	

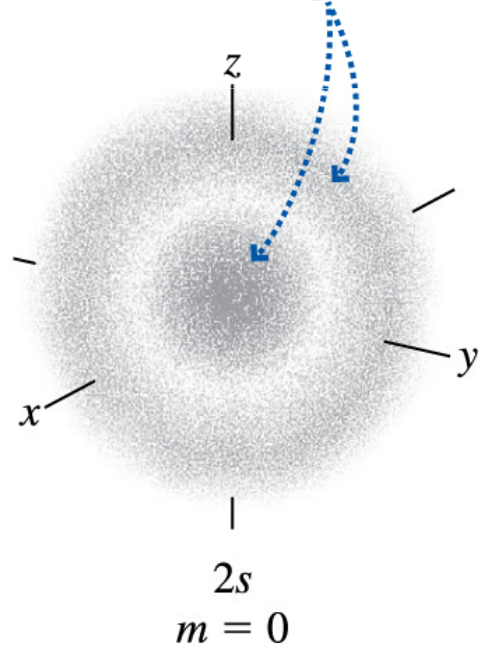


Átomo de Hidrogênio

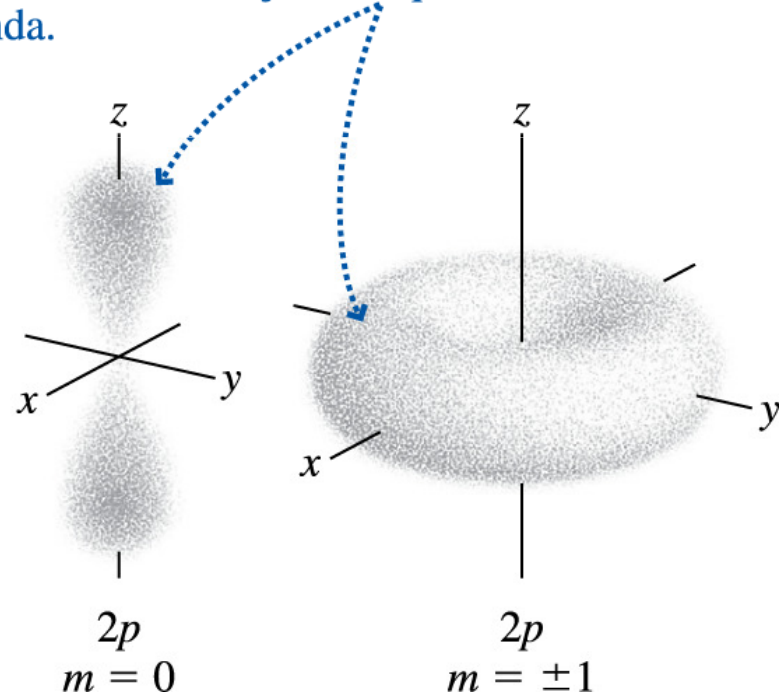
Um elétron no estado $1s$ tem maior probabilidade de ser encontrado na origem.



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



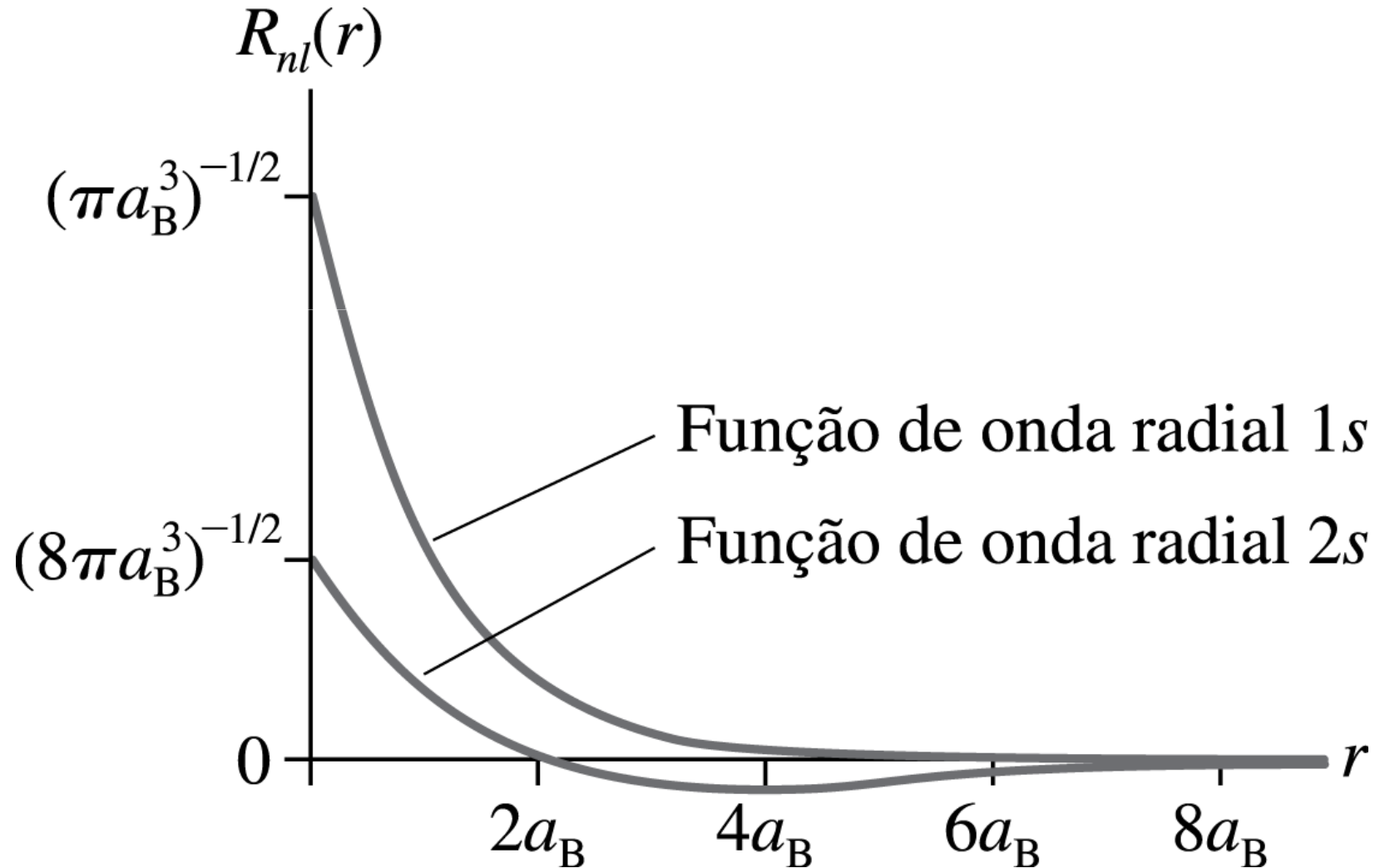
A probabilidade de encontrar elétrons p é maior em algumas direções do que em outras.



Átomo de Hidrogênio



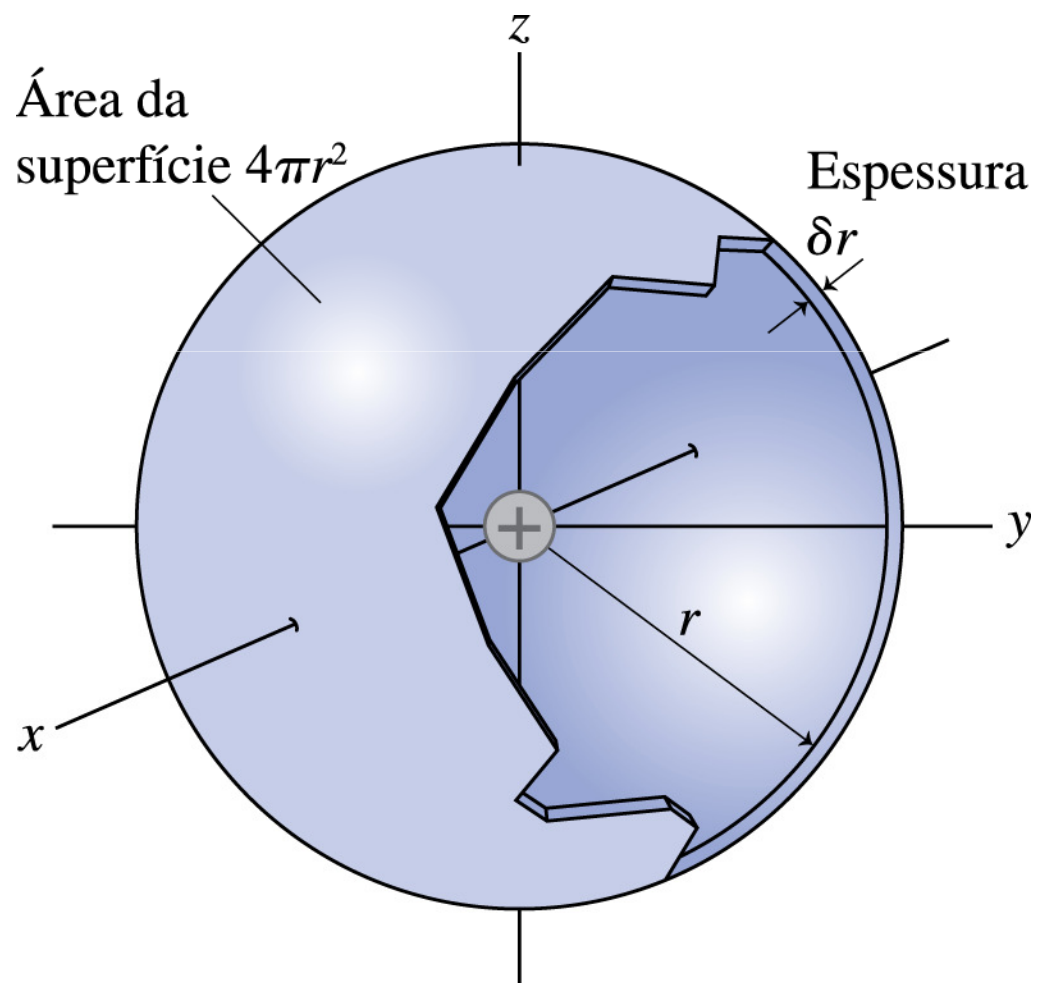
Funções de onda para $n = 1$ e $l = 0$ (1s) e $n = 2$, $l = 0$ (2s)



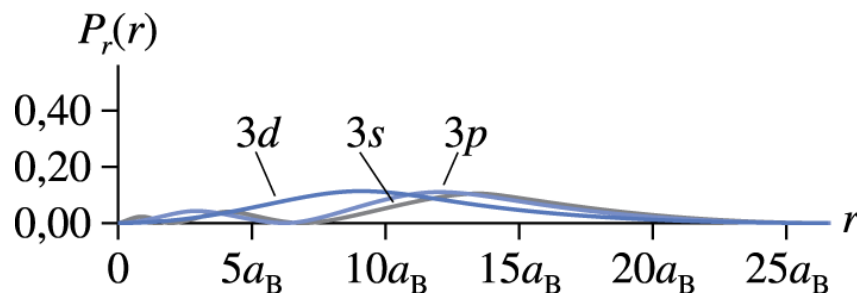
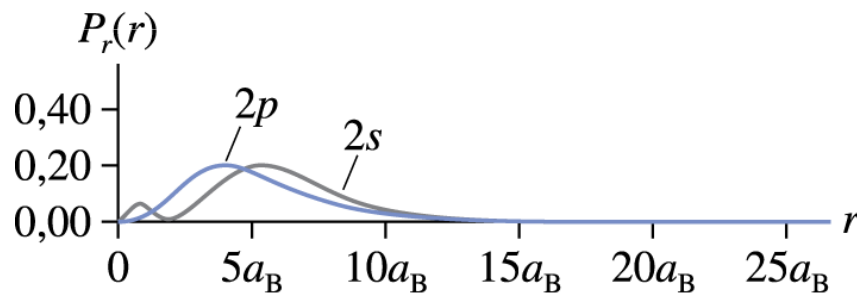
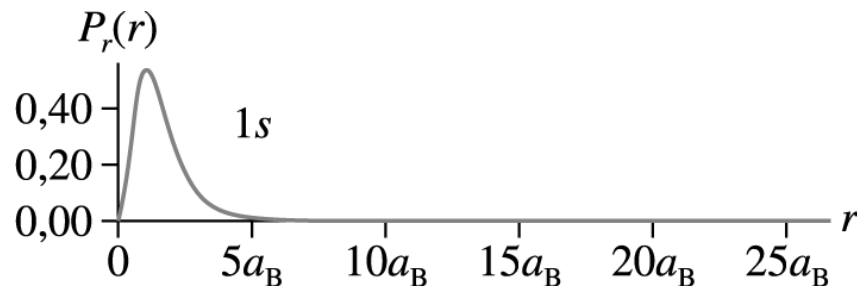
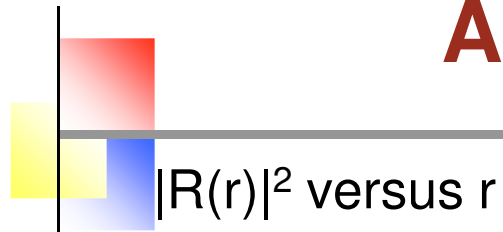
Átomo de Hidrogênio



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 onda espalhada no espaço.

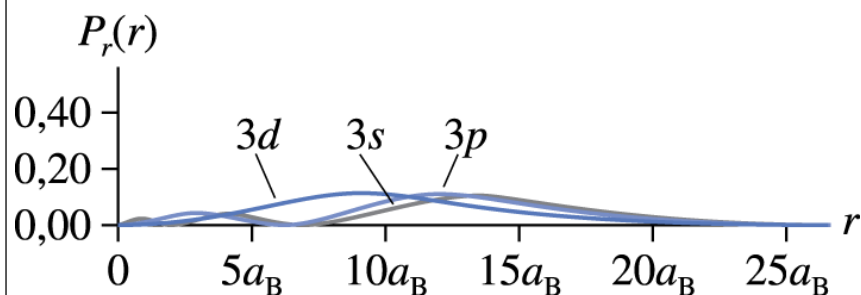
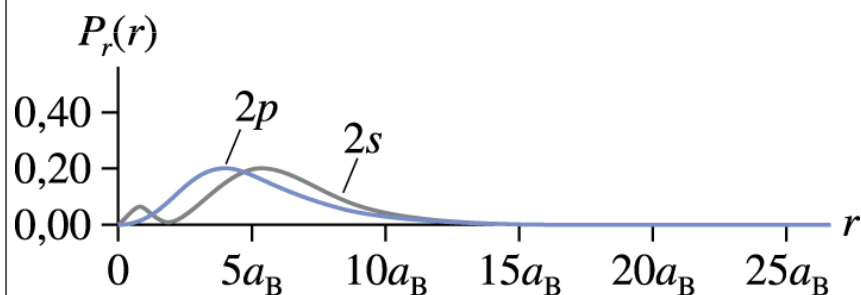
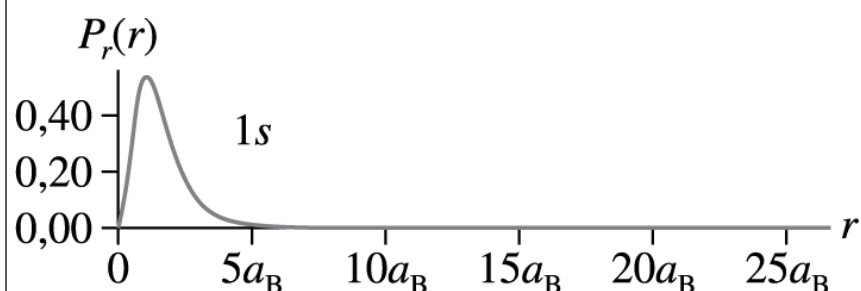
Ambas as órbitas têm a mesma energia total E .

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

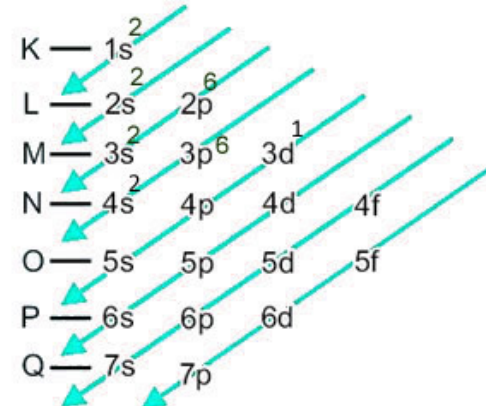
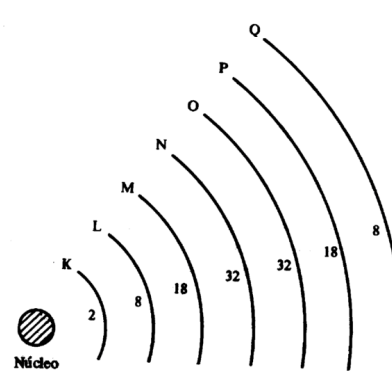


$|R(r)|^2$ versus r

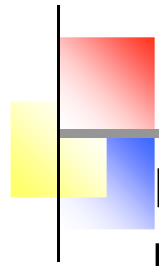


- 1) Para $n = 1$; a_B (o máximo)
- 2) Para $n = 2$; entre $3a_B$ e $7a_B$
- 3) Para $n = 3$; entre $8a_B$ e $15a_B$

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



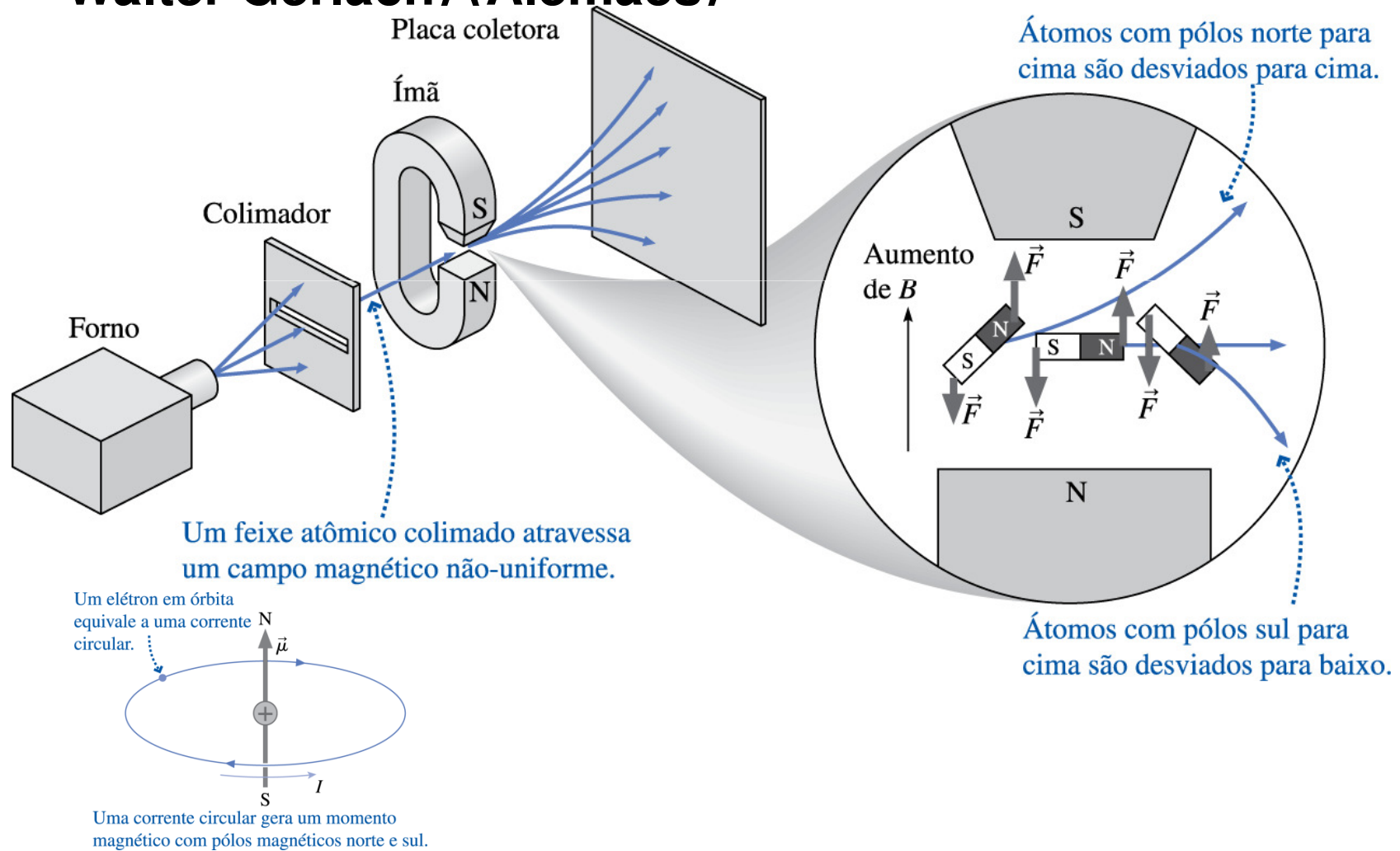
Átomo de Hidrogênio



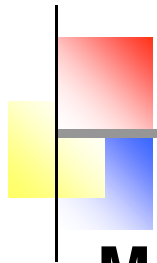
Ex. 42.3 Mostre que um elétron no estado 2p tem maior probabilidade de ser encontrado em $r = 4a_B$.

O spin do elétron

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

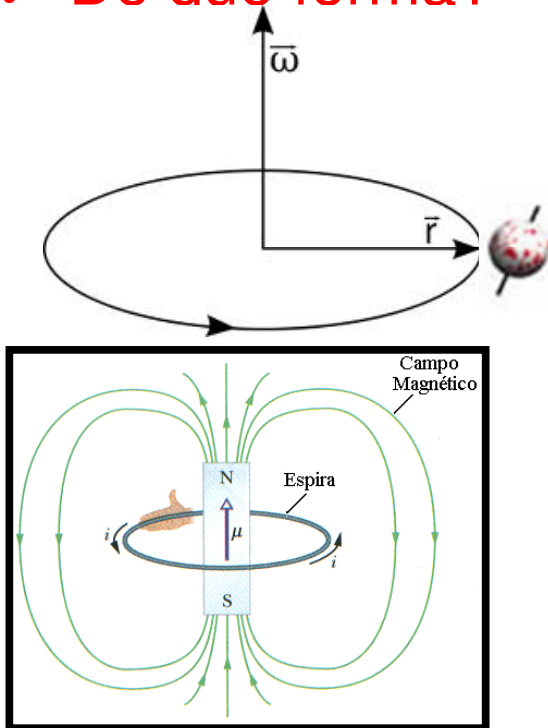


Momento magnético



Momento Magnético Orbital

- De que forma?



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

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

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

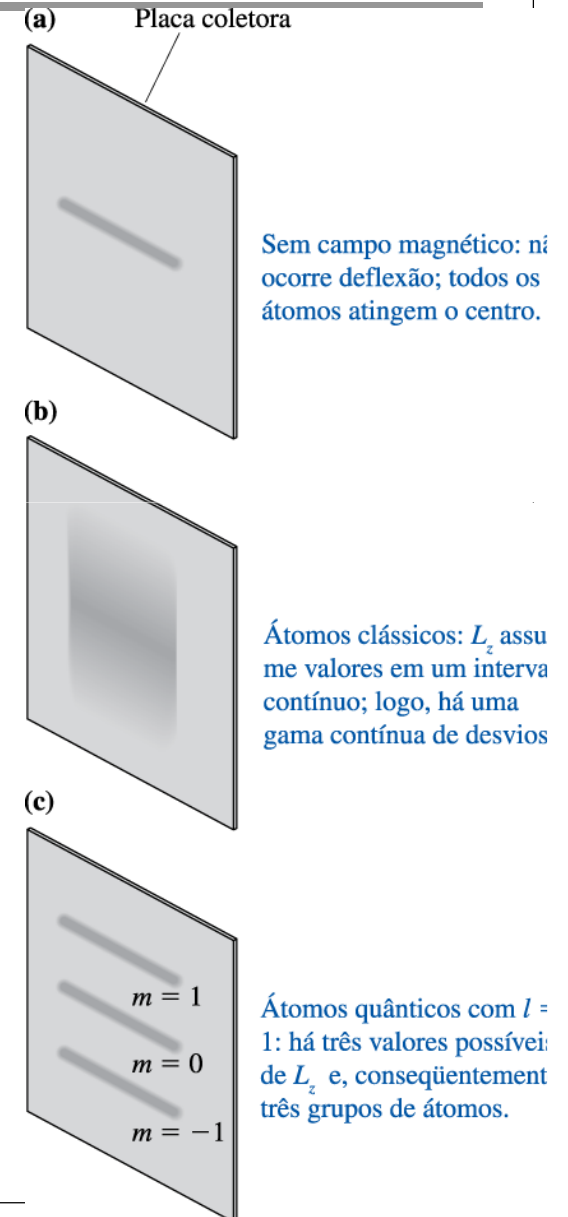
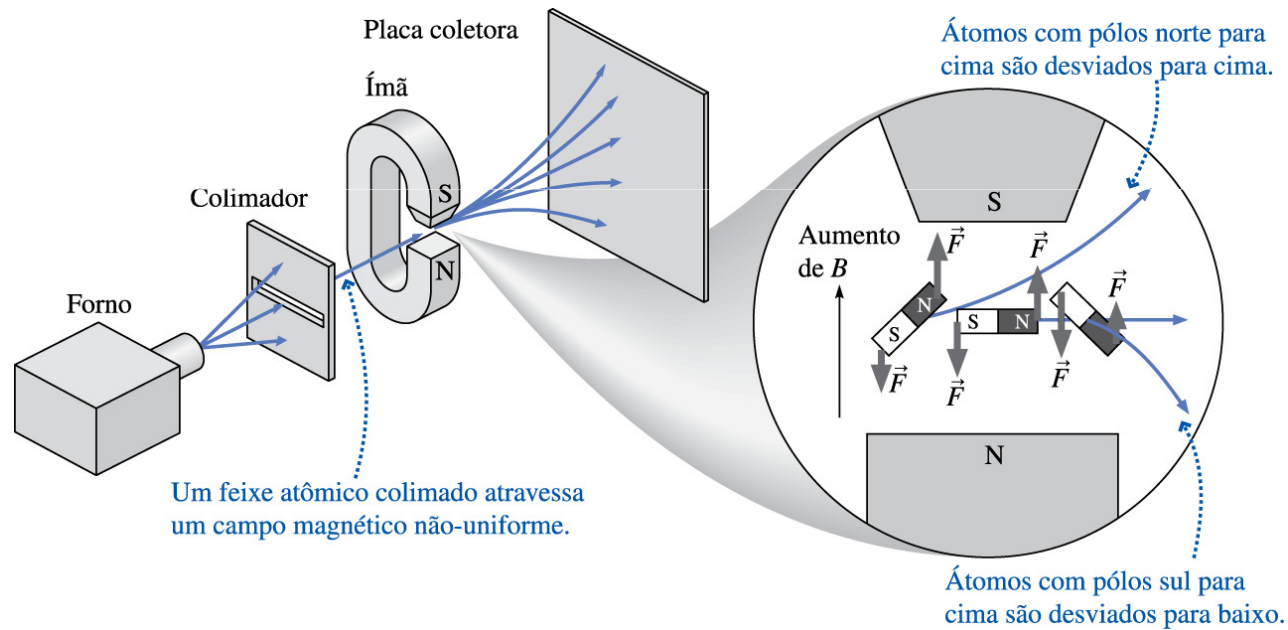
$$\vec{\mu} = -\mu_B \vec{L}$$

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

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

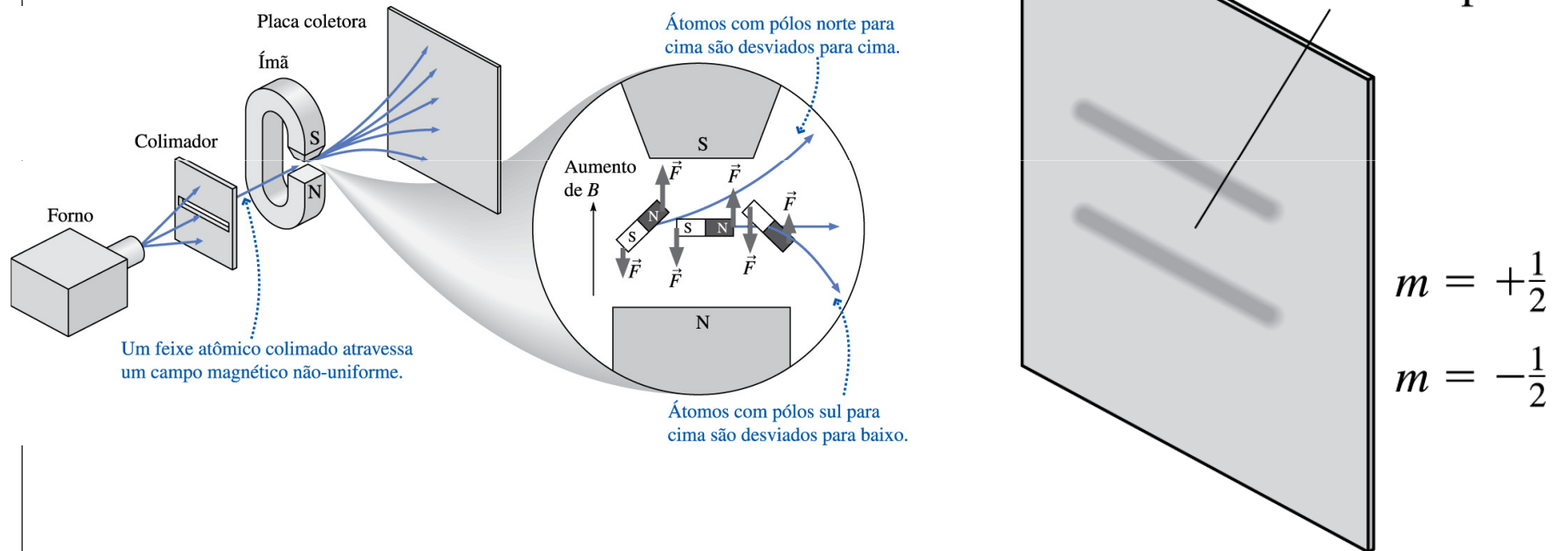
O spin do elétron

Experimento de Stern-Gerlach: O que seria esperado?



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 ($2l + 1$)



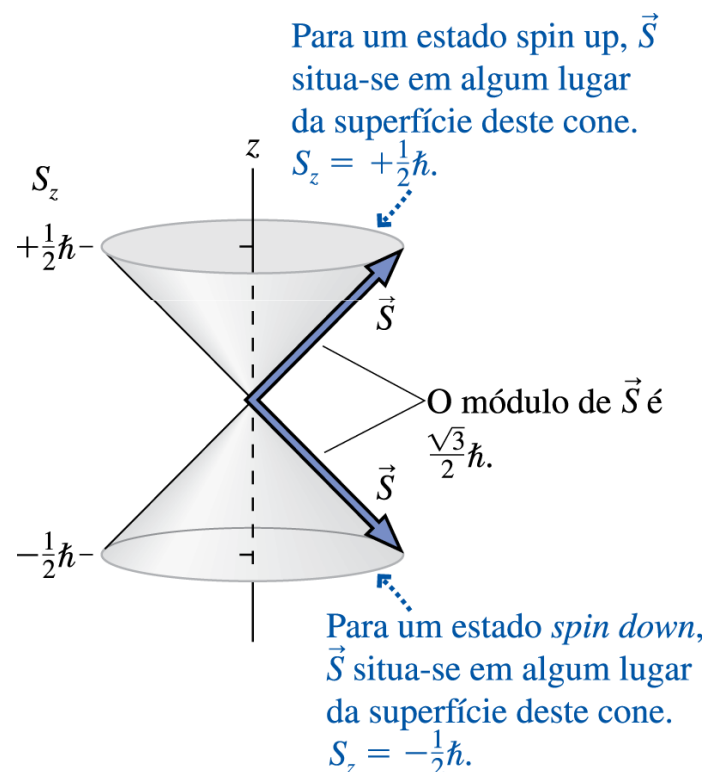
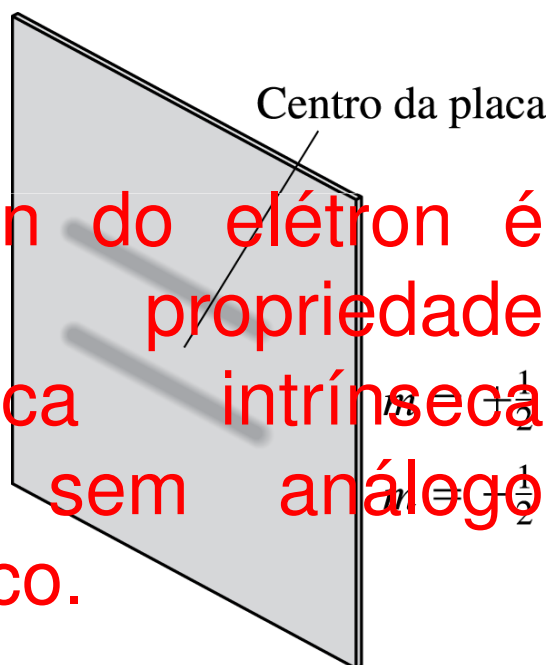
Parece que há um outro momento angular (outro momento magnético), além do orbital. Sugeriu-se que há um momento magnético *intrínseco* (Spin).

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 ($m_s = +\frac{1}{2}$ e $m_s = -\frac{1}{2}$).

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



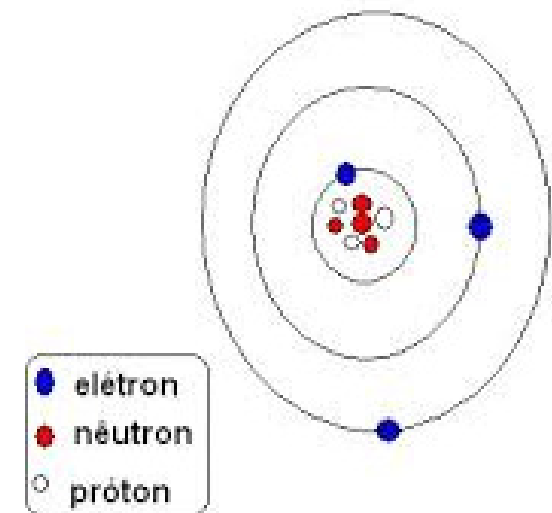
Assim, precisamos de quatro números quânticos para caracterizar os estado estacionários de um átomo (n, l, m, m_s)

Átomos multieletrônicos

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

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

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

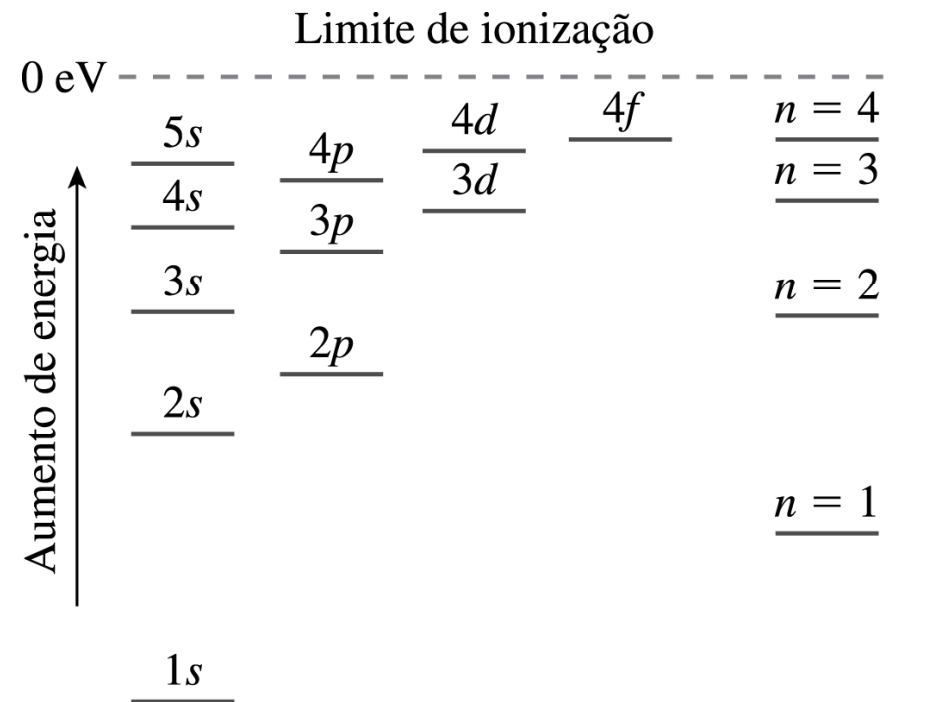
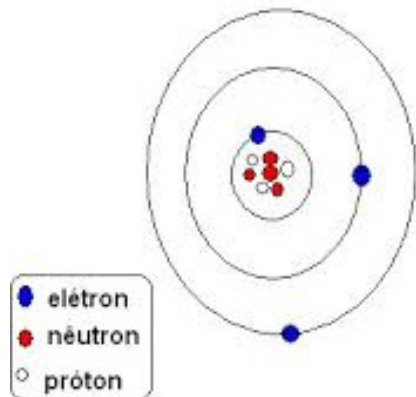


Átomos multieletrônicos

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

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

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



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

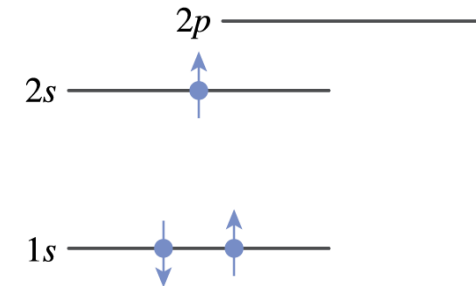
As linhas horizontais representam as energias permitidas.

Cada círculo representa um elétron naquele nível de energia.

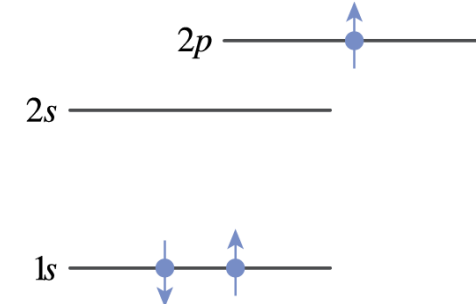
(b) Estado excitado do He

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

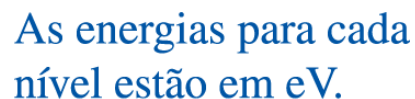


(b) Estado excitado do Li



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).

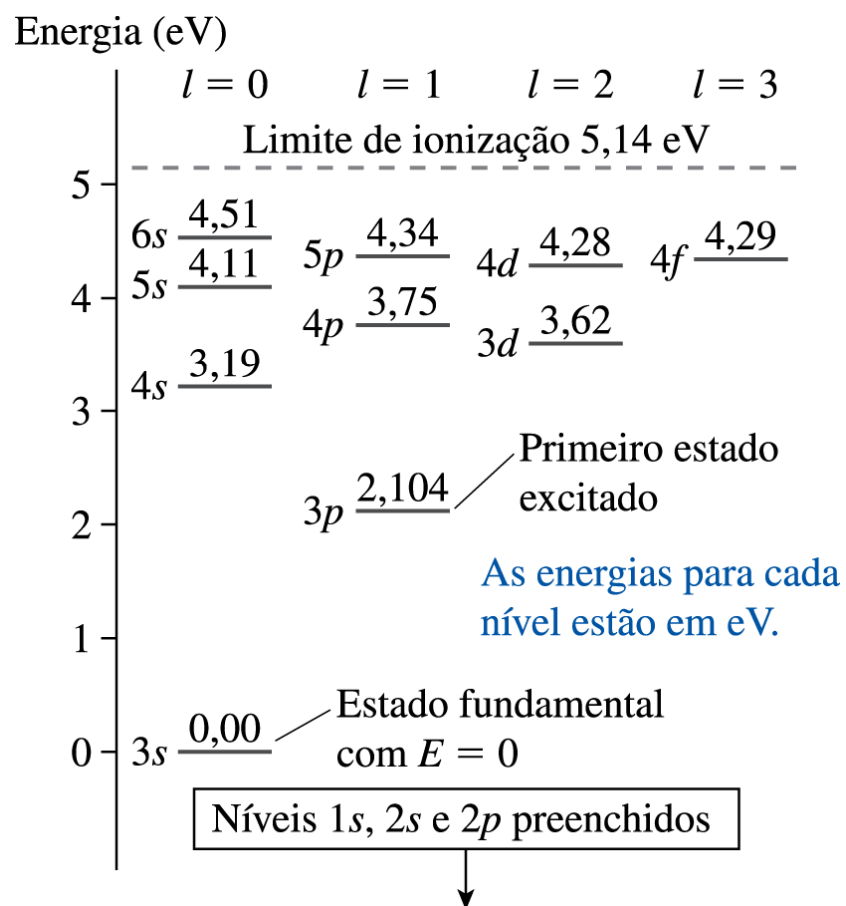
Energia (eV)



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.

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

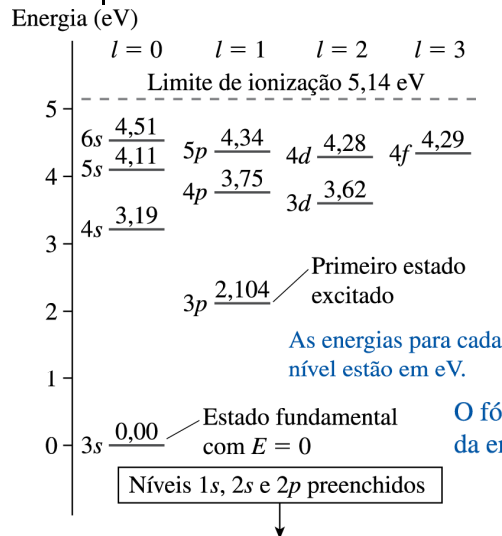
$$\lambda = \frac{c}{f} = \frac{hc}{\Delta E_{\text{átomo}}}$$

Qualquer transição é possível??

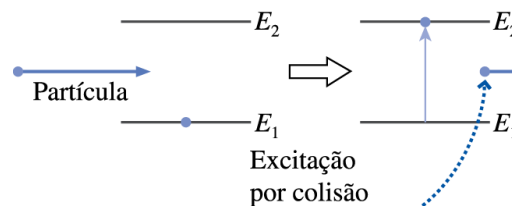
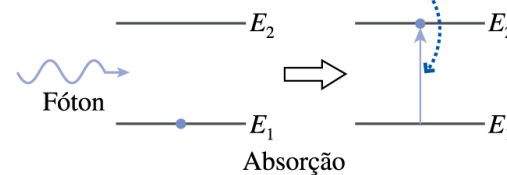
Resposta: Não

Estados excitados e espectros

Átomos multieletrônicos:



O fóton desaparece. A conservação da energia exige que $E_{\text{fóton}} = E_2 - E_1$.



A partícula leva consigo parte da energia original. A conservação da energia exige que $E_{\text{partícula}} \geq E_2 - E_1$.

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??

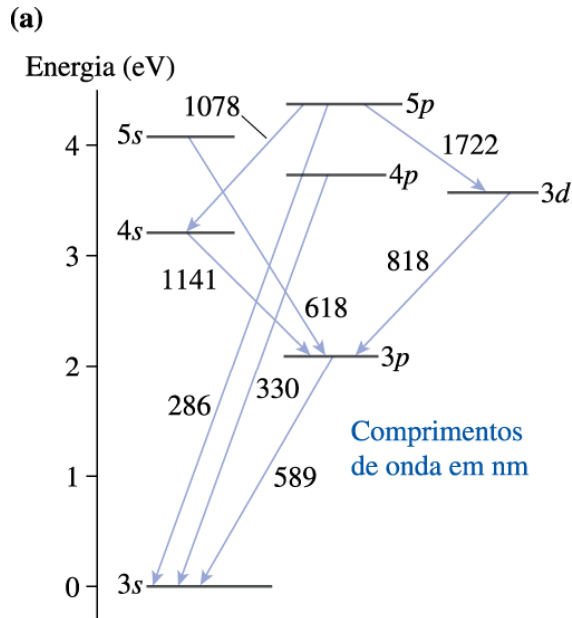
Resposta: Não

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.

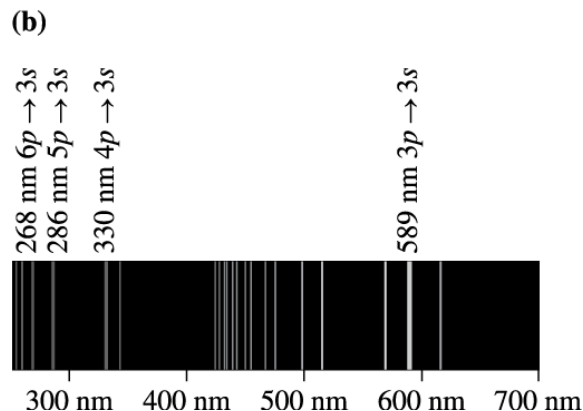
$$f = \frac{\Delta E_{\text{átomo}}}{h} = \frac{E_2 - E_1}{h}$$

Qualquer transição é possível??

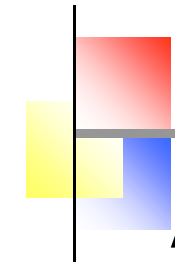
Resposta: Não

Regra de seleção para emissão ou absorção:

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

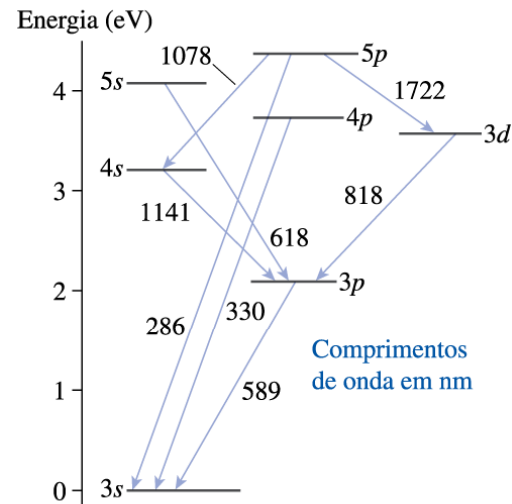


Tempos de vida médio



Átomos multieletrônicos:

(a)

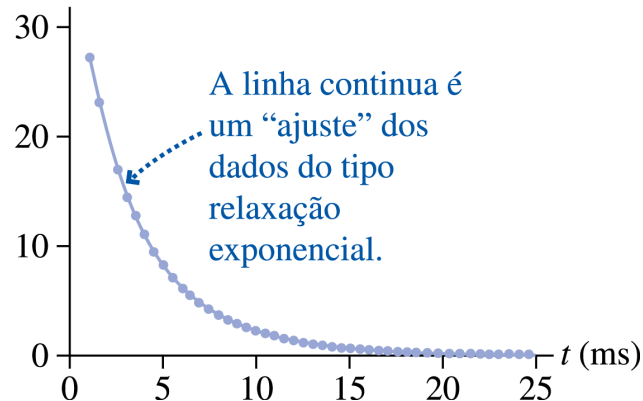


Equação de relaxação:

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

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

Número de fótons
(milhares)



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

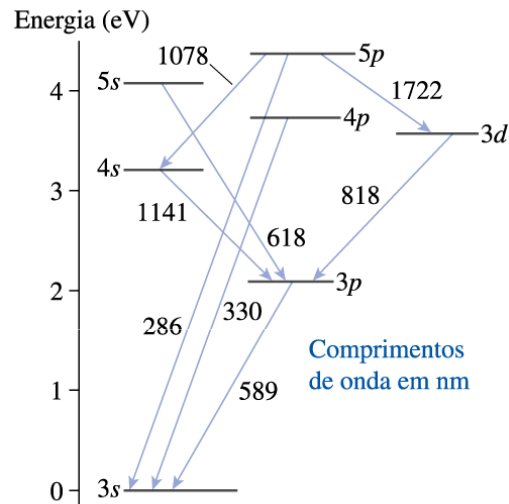
r - taxa de relaxação (s^{-1})

Tempo de vida: desde ms até ns.

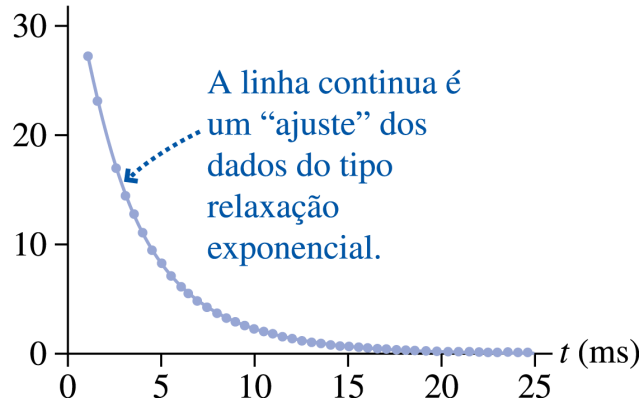
Tempos de vida médio

Átomos multieletrônicos:

(a)



Número de fótons
(milhares)



Equação de relaxação:

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

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

Ex. 42.8 - Tempo de vida média de um estado excitado do mercúrio:

O átomo de mercúrio possui dois elétrons de valência. Um deles está sempre no estado 6s, o outro em um estado correspondente aos números quânticos n e l . Um dos estados excitados do mercúrio é designado com 6s6p. A taxa de relaxação desse estado é de $7,7 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$.

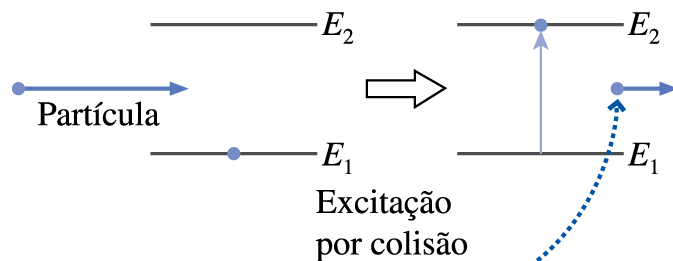
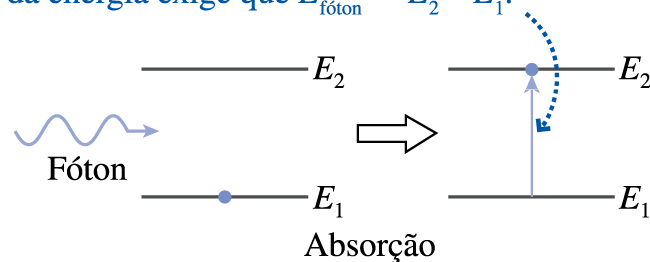
- Qual é o tempo de vida média desse estado?
- Se 1×10^{10} átomos de mercúrio são criados no estado 6s6p em $t = 0$, quantos fótons serão emitidos durante o primeiro 1,0 ns posterior?

Emissão estimulada e lasers

Laser: *L*ight *a*mplification by *s*timulated *e*mission of *r*adiation

Excitação (absorção):

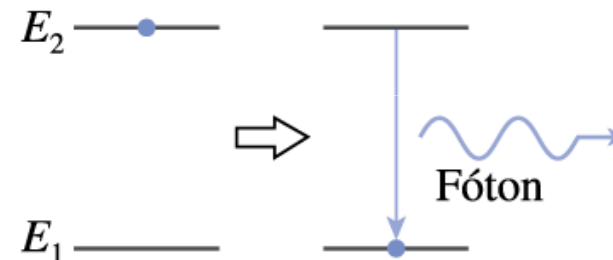
O fóton desaparece. A conservação da energia exige que $E_{\text{fóton}} = E_2 - E_1$.



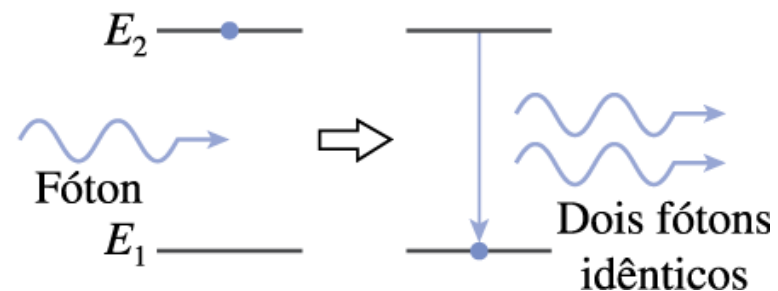
A partícula leva consigo parte da energia original. A conservação da energia exige que $E_{\text{partícula}} \geq E_2 - E_1$.

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

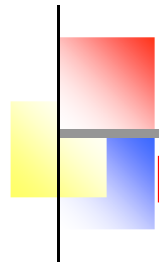
(b) Emissão espontânea



(c) Emissão estimulada



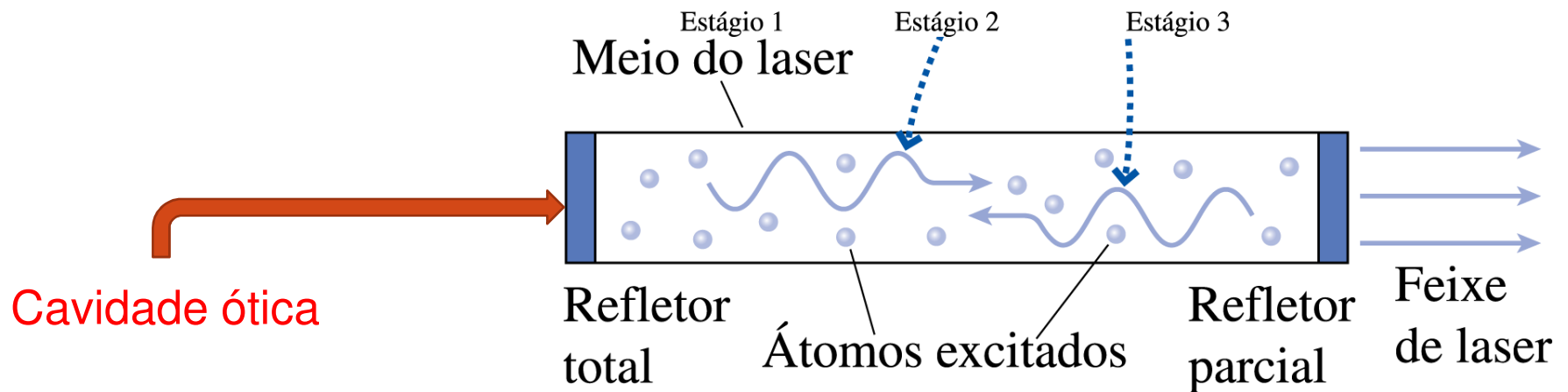
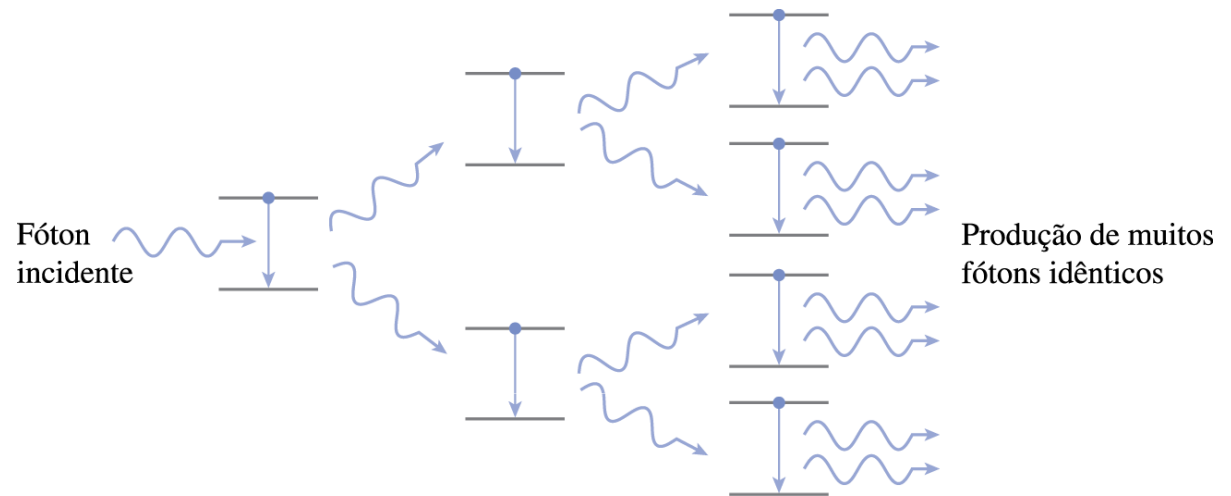
Emissão estimulada e lasers



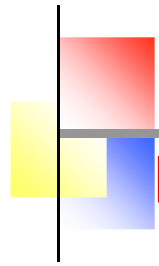
Laser: *L*ight *a*mplification by *s*timulated *e*mission of *r*adiation

Excitação:

Luz coerente: ondas eletromagnéticas com mesma fase, amplitude e sentido de propagação.



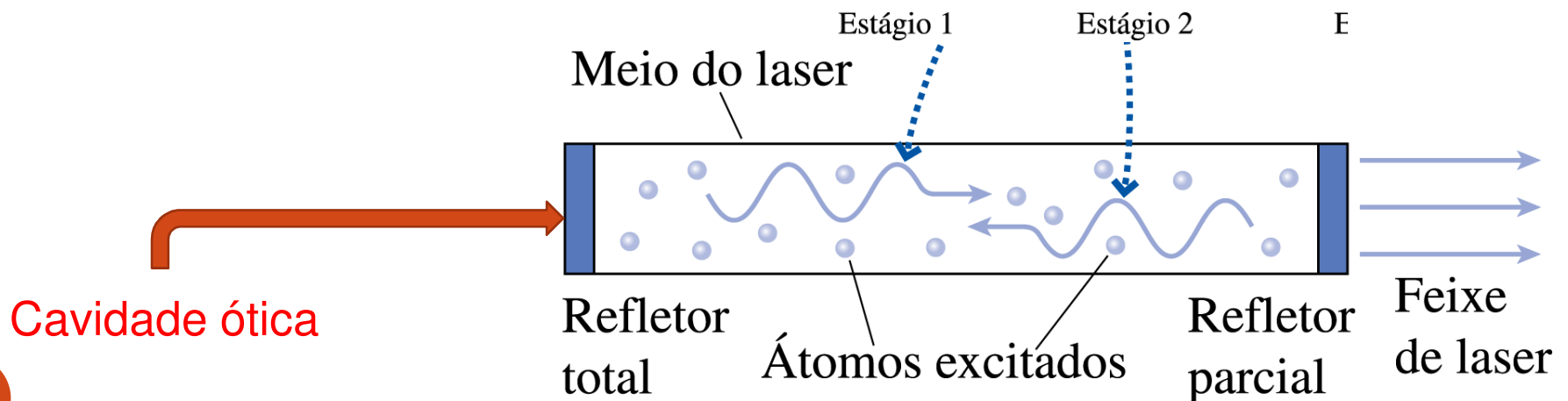
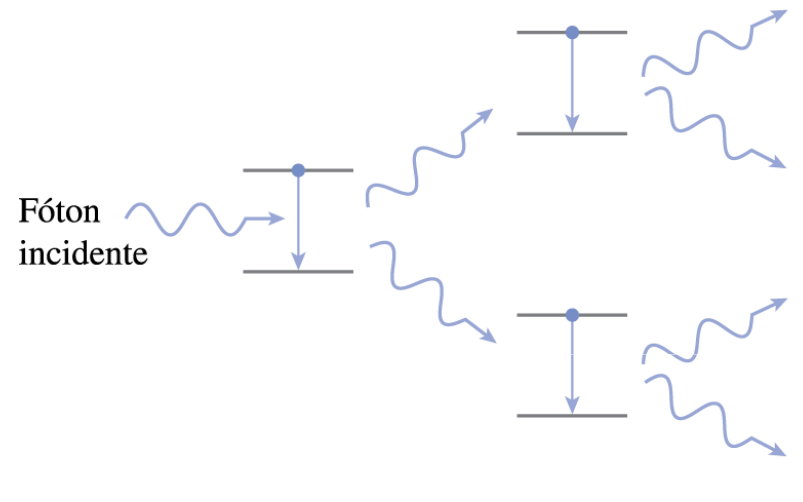
Emissão estimulada e lasers



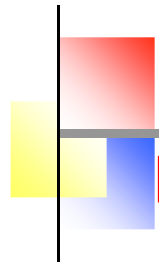
Laser: *Light amplification by stimulated emission of radiation*

Excitação:

Inversão de população:
número de átomos no estado excitado tem que ser maior que o do estado fundamental

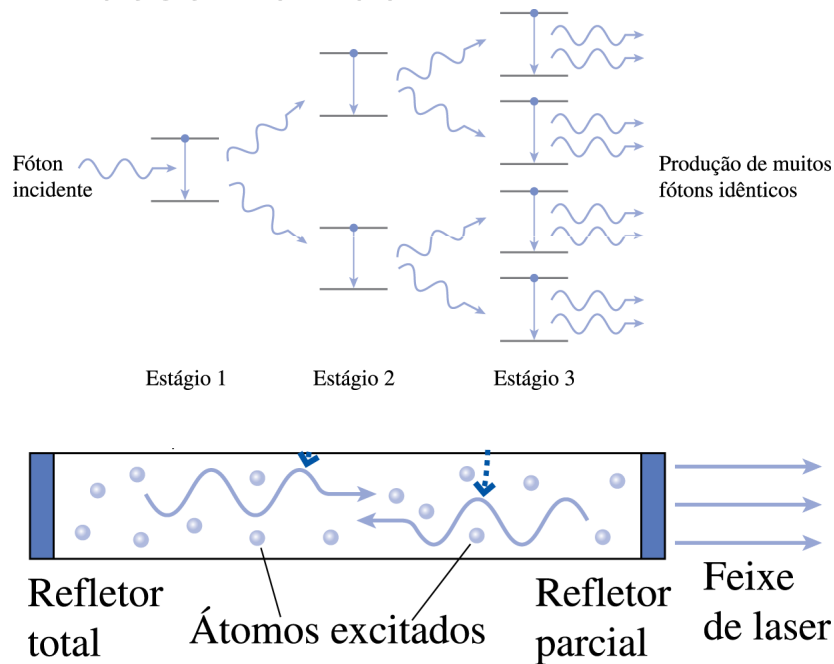


Emissão estimulada e lasers



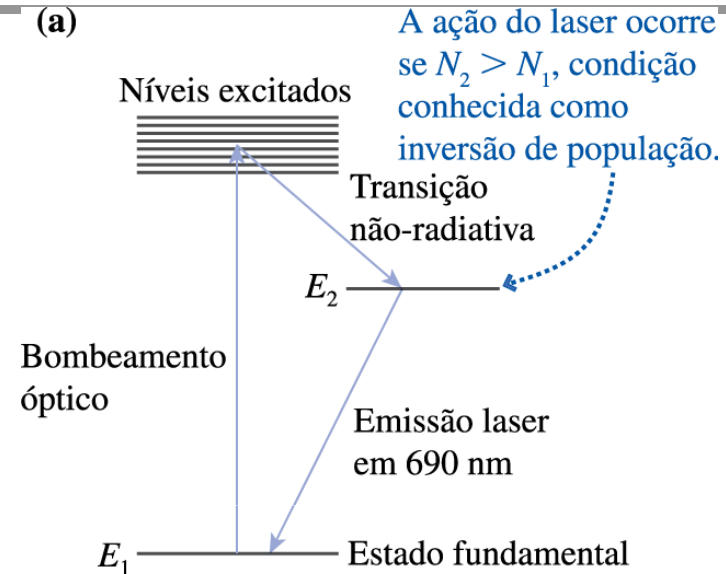
Laser de Rubi

Laser de Rubi – Primeiro laser desenvolvido

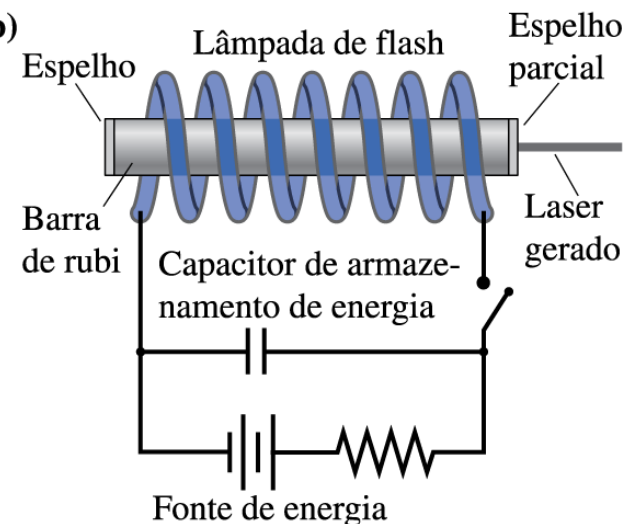


10 ns – libera 1 J de energia.
Isso corresponde a 100 MW de
potência. (pequena cidade)

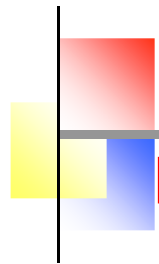
(a)



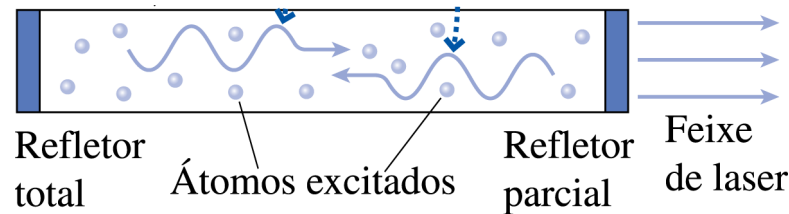
(b)



Emissão estimulada e lasers



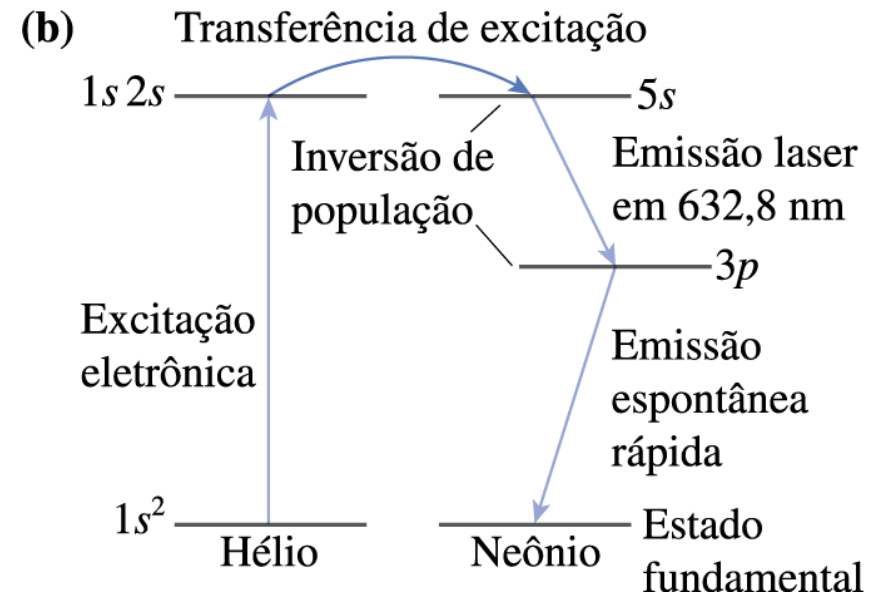
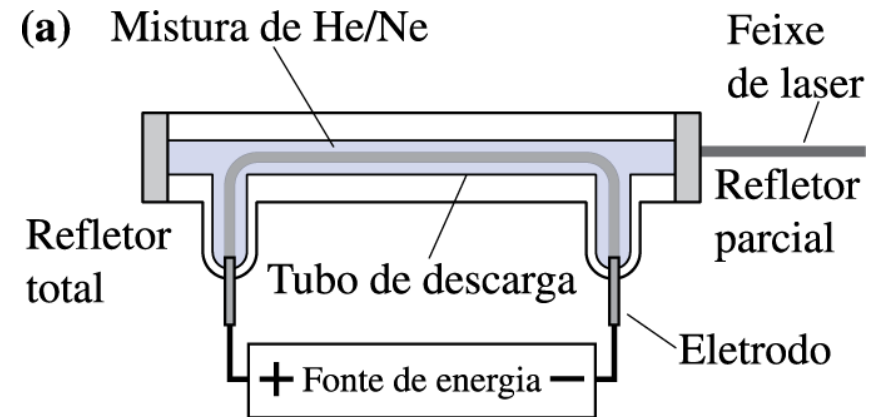
Laser de He/Ne



Rubi: 632,8 nm libera 1 mW de potência.

Laser de argônio: azul e verde com potência de 20 W.

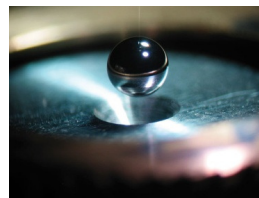
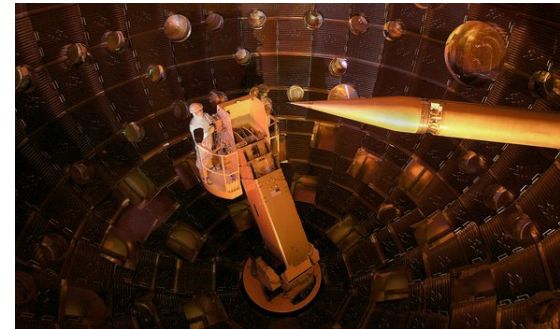
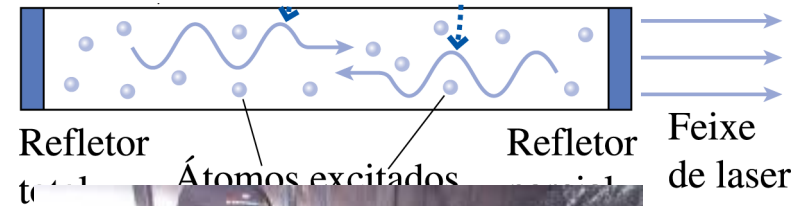
Laser de dióxido de carbono: 1000 W em 10,6 μm (10 600 nm) aplicações industriais para corte.



Emissão estimulada e lasers

Laser para fusão nuclear.

Potência: 500 TW (10^{12} W)
para fundir uma cápsula de
deutério.



Níveis de energia para partícula em uma caixa

