

Para os átomos de 1 elétron:

resolvemos a equação de Schrödinger, achamos:

•  $\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) \Theta_{lm}(\theta) \Phi_{lm}(\phi)$

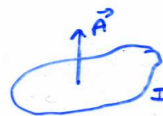
•  $E_n = -(13,6 \text{ eV}) \frac{Z^2}{n^2}$

• A camada de energia  $E_n$  é degenerada, ela abriga subcamadas de índice  $l = 0, \dots, n-1$ . As próprias subcamadas abrigam orbitais de índice  $m_l = -l, \dots, +l$ . (E cada orbital abriga 2 estados de spin, como veremos)

No modelo de Bohr, não existe esta degenerescência. Há como verificar a existência de todas estas orbitais experimentalmente?

### Efeito Zeeman §43-3

Revisão: uma espira plana de área  $\vec{A}$  conduzindo uma corrente  $I$  tem momento magnético de dipolo:  $\vec{\mu} = I\vec{A}$ .



Quando  $\vec{\mu}$  é colocado num campo magnético externo, este exerce um torque  $\vec{\tau} = \vec{\mu} \wedge \vec{B}$  sobre o dipolo. A energia potencial associada com esta interação é:  $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ .

Nosso tratamento agora para o átomo de 1 elétron vai ser simplificado (p.ex. usaremos o modelo de Bohr). Um tratamento mais rigoroso com a mecânica quântica é possível e os resultados são os mesmos.

2

No modelo de Bohr, o elétron na sua órbita de raio  $r$  (e velocidade  $v$ ) dados, é equivalente a uma espira de corrente de área  $\pi r^2$ . A corrente é:  $\frac{e}{T}$  com  $T$  período,  $= \frac{2\pi r}{v}$ . Então:

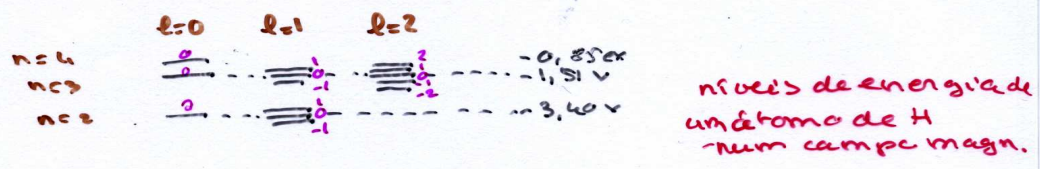
$$\mu = IA = \frac{ev}{2\pi r} \times \pi r^2 = \frac{evr}{2}$$

Usando  $L = mvr$ , podemos escrever  $\mu = \frac{e}{2m} L$ .  
 [  $\mu/L = e/(2m) \equiv$  razão giro magnética ]

No modelo de Bohr  $L = m\hbar$  com  $n=1, \dots$   
 $\Rightarrow \mu = \frac{e\hbar}{2m}$  para  $n=1$   
 $\equiv \mu_B$ , magneton de Bohr.  
 $= 9,274 \cdot 10^{-24}$  J/T.

No modelo quântico, poder-se mostram que  
 ainda tem:  $\mu = e/(2m)L$ ,  
 MAS

$L=0$  é possível pois  $L = \sqrt{l(l+1)} \hbar$  com  $l=0, \dots, n-1$ .  
 Supomos  $\vec{B}$ , o campo magnético externo,  $\parallel O_z$   
 $\Rightarrow U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B_z = -\left(\frac{e}{2m} L_z\right) B_z = +\frac{e\hbar}{2m} m_l B = \mu_B B m_l$ ,  
 com  $m_l = -l, \dots, +l$ .  
 $\Rightarrow$  O efeito de  $\vec{B}$  é deslocar de  $U$  cada energia de  
 uma orbital  $E_n \rightarrow E_n + \mu_B B m_l$



$n=1$   $\mu_B B$  -----  $-13,6 \text{ eV}$

na presença de um campo magn. ext.

Este desdobramento das linhas espectrais foi observado em 1896 por Zeeman e por isto tem seu nome.



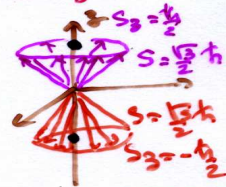
## O spin do elétron §43.4

Os espectros capistas encontraram outros desdobramentos dos níveis de energia, alguns com espaçamentos diferentes (≡ efeito Zeeman anormal). Havia também desdobramentos na ausência de campo magnético externo.

Em 1922, os físicos alemães Stern e Gerlach fizeram átomos de prata neutros atravessarem um campo magnético não-uniforme. Eles observaram que o feixe se dividia em 2. Isto não era em acordo com a previsão da mecânica quântica:  $2l+1$  é ímpar. Isto sugere que existe outro número quântico do elétron, com valor semi-inteiro.

Este número quântico do elétron é associado ao momento angular de spin  $\vec{S}$ . Em analogia com  $\vec{L}$ :

$$S = \sqrt{s(s+1)} \hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar \text{ pois } s = 1/2$$
$$S_z = m_s \hbar = \pm \frac{\hbar}{2} \text{ pois } m_s = \pm 1/2$$



Este número quântico é uma característica do elétron, como sua carga (não precisa por exemplo de um campo magnético para ele se manifestar).

Às vezes, considera-se que os valores positivos para  $m_s$  correspondem aos 2 sentidos de rotação de elétron sobre si mesmo. Isto não é muito correto pois o elétron não é localizado. Porém ajuda a entender o desdobramento das linhas na ausência de campo magnético externo. Um observador ligado ao elétron vê o núcleo positivo girando ao redor, o que produz um campo magnético. A interação entre este campo magnético e o momento magnético de spin do elétron  $\mu_B = -2 \frac{e}{2m} S_z$  produz o deslocamento.

## Átomos com muitos elétrons §43-5

Vimos que o estado de um átomo de 1 elétron podia ser descrito pelos números quânticos:

$$n, l, m_l, m_s.$$

Na verdade estes 4 números quânticos podem ser usados para descrever todos os estados eletrônicos de um átomo qualquer.

A razão é a seguinte. A equação de Schrödinger fica mais complicada pois cada elétron interage não só com o núcleo mas com todos os outros elétrons. Na aproximação de campo central, a energia potencial correspondendo a estas interações sobre um dado elétron é suposta esfericamente simétrica. Assim devemos substituir na eq. de Schrödinger.

$$-\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \text{ por } U(r)$$

Na função de onda:  $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$ ,  $\Theta$  e  $\Phi$  não mudam  $\Rightarrow l$  e  $m_l$  não mudam de significado.  $m_s$  também não. Por outro lado  $R$  é diferente e a energia passa a depender de  $n$  e  $l$ , não só de  $n$ .

Para entender a estrutura atômica de átomos com muitos elétrons, precisamos de uma regra adicional, descoberta por Pauli (1925); o princípio de exclusão que diz que 2 elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico  $n, l, m_l, m_s$ .

Preenchemos as subcamadas por energia crescente (agora a energia depende de  $n \leftrightarrow$  camada e  $l \leftrightarrow$  subcamada). A regra de Madelung diz que as subcamadas são preenchidas por ordem de  $m$  em  $n$   $n+l$ ; se o  $n+l$  for o mesmo, primeiro vem o de menor  $n$ .  
(existe exceções)



graficamente:

$n$	$l=0$	1	2	3	4	Ordem de preenchimento das orbitais externas
1	<del>1s</del>					1s
2	<del>2s</del>	2p				2s
3	<del>3s</del>	<del>3p</del>	3d			3p
4	<del>4s</del>	4p	4d	4f		4s
5	<del>5s</del>	<del>5p</del>	<del>5d</del>	5f	5g	3d
						etc

(→ Setas de  $m+l$  fixo, sentido crescente)

Preenchemos as orbitais de mesma energia com spins desparelhados (regra de Hund... existk exceções também)

Assim obtemos:

$Z$	Elemento	1s	2s	2p	Configuração eletrônica
1	H	↑			1s <sup>1</sup>
2	He	↑↓			1s <sup>2</sup>
3	Li	↑↓	↑		1s <sup>2</sup> 2s <sup>1</sup>
4	Be	↑↓	↑↓		1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup>
5	B	↑↓	↑↓	↑	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>1</sup>
6	C	↑↓	↑↓	↑↑	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>
	etc.				

Além de explicar a ordem dos elementos na tabela periódica, a mecânica quântica permite entender porquê certos elementos km propriedades químicas similares. Por exemplo na última coluna:

He 1s<sup>2</sup> completa + lacuna grande até a próxima subcam.  
 Ne 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>6</sup> " " "  
 Ar 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>6</sup>3s<sup>2</sup>3p<sup>6</sup> " " "  
 Kr  
 Xe  
 Rn

⇒ Estes elementos + interação pouco (gases nobres)

## Formulário

$$E = hf = hc/\lambda, \quad E = pc,$$

$$E = m_0\gamma c^2, \quad \vec{p} = m_0\gamma\vec{v}, \quad E_{cin} = m_0\gamma c^2 - m_0c^2, \quad \text{onde } \gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2},$$

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}, \quad \lambda' = \lambda + \lambda_C(1 - \cos\theta), \quad \text{onde } \lambda_C = h/(m_0c).$$

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar/2, \quad \Delta E \Delta t \geq \hbar/2, \quad \hbar = h/(2\pi).$$

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

**Questão 4**

Num átomo neutro no estado fundamental as camadas  $n = 1$  e  $n = 2$  estão totalmente preenchidas. Além disto, há 6 elétrons na camada  $n = 3$ .

- (a) (1,0 ponto) Determine os números quânticos  $n$ ,  $\ell$ ,  $m_\ell$  e  $m_s$  de todos os elétrons e o número atômico  $Z$  deste átomo.
- (b) (1,0 ponto) Quais são os valores possíveis do módulo do momento angular orbital e sua projeção sobre o eixo  $z$  para um elétron deste átomo?
- (c) (0,5 ponto) Quais são os valores possíveis do módulo do momento angular de spin e sua projeção sobre o eixo  $z$  para um elétron deste átomo?

2008

#### Questão 4

O átomo de flúor tem número atômico  $Z = 9$ .

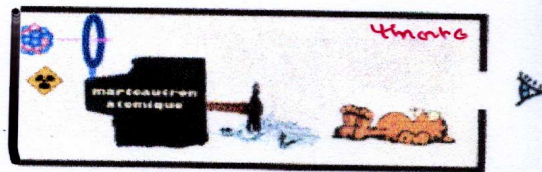
- (a) (1,5 ponto) Escreva a configuração eletrônica do átomo de flúor e os números quânticos  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  e  $m_s$  para cada elétron.
- (b) (1,0 ponto) Numa transição entre dois estados o átomo de flúor permanece no estado de maior energia durante um intervalo de tempo  $\Delta t = 2,5 \times 10^{-8}$  s antes de emitir um fóton e decair ao estado de menor energia. Qual é a incerteza mínima na energia em elétron-volts daquele estado de maior energia?

Dado:  $\hbar = 6,6 \times 10^{-16}$  eV·s.



## O gato de Schrödinger

Coloque um gato numa caixa, com um pouco de substância radiativa, uma quantidade de tão pequena que após 1 hora, tem probabilidade de 50% de ter tido 1 decaimento, e 50% para 0 decaimento. Se há decaimento, o detector registra isto e aciona um martel, o qual quebra um frasco de veneno e o infeliz gato morre. Assim após 1 hora, a chance de o gato ser vivo é 50% e morto 50%.  
 A sua função de onda é:  $\psi = \psi_{\text{vivo}} + \psi_{\text{morto}}$ .



Ele é vivo e morto.



Da mesma maneira, para obter a probabilidade de encontrar um elétron sobre a tela numa experiência de fenda dupla, devemos usar a função de onda:  $\psi = \psi_1 + \psi_2$  com  $|\psi_i|^2$  proba. de passar na 1ª fenda, e  $|\psi_2|^2$  na 2ª. Somente com um detector localizado perto de uma fenda, podemos dizer por qual fenda o elétron passou. Sem detector, ele passa pelas duas.

Da mesma maneira, quando após 10 anos após 1h, sabemos se o gato é vivo ou morto, ... até olharmos ele estava meio-vivo???, foi nossa observação que o matou???

Uma explicação bastante aceita é que o que faz papel de observação não é nós, mas o disparo do detector.

Outra explicação é que ambas as possibilidades "monta" e "nua" existem e há 2 universos paralelos sem possibilidade de comunicação entre si.

Etc.

A mecânica quântica tem muitos sucessos mas sua interpretação ainda é objeto de pesquisa. (Pode ser que as futuras gerações riam de nós.)