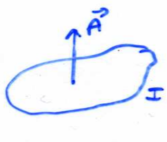
Para os átomos de 1 elétron:
resolvemos a equação de Schrödinger, achamos:

- $\psi_{n\ell m_\ell}(r,\theta,\varphi) = R_{n\ell}(r)\,\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)\,\Phi_{m_\ell}(\varphi)$
- $E_n = -(13{,}6\,eV)\,\frac{Z^2}{n^2}$
- A camada de energia E_n é degenerada, ela abriga subcamadas de índice $\ell = 0,1,\dots n-1$. As próprias subcamadas abrigam orbitais de índice $m_\ell = -\ell,\dots,+\ell$. (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 (por ex. usaremos o modelo de Bohr). Um tratamento mais rigoroso com a mecânica quântica é possível e os resultados são os mesmos.

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 πr^2. A corrente é: $\frac{e}{T}$ com T período, $= 2\pi r/v$. Daí:

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

Usando $L = mvr$, podemos reescrever $\mu = \frac{e}{2m} L$.

$\therefore \left[\mu/L = e/(2m) \equiv \text{razão giromagnética}\right]$

No modelo de Bohr $L = n\hbar$ com $n = 1, \ldots$

$\Rightarrow \quad \mu = \frac{e\hbar}{2m}$ para $n = 1$

$\equiv \mu_B$, magnéton de Bohr.

$= 9{,}274 \; 10^{-24}$ J/T.

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

MAS

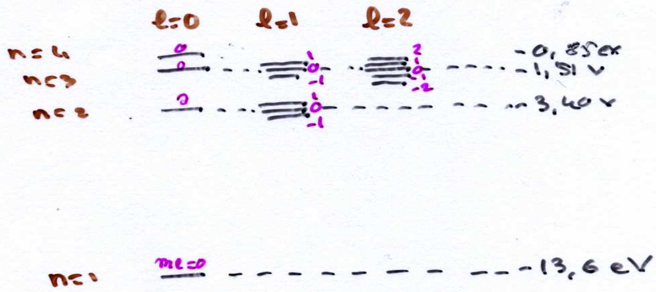
$L = 0$ é possível pois $L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar$ com $\ell = 0, \ldots n-1$.

Supomos $\vec{B}$, o campo magnético externo, $// Oz$

$\Rightarrow U = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = -\mu_z B_z = -\left(\frac{-e}{2m} L_z\right) B_z = +\frac{e\hbar}{2m} m_\ell B = \mu_B B m_\ell$,

com $m_\ell = -\ell$ a $+\ell$.

$\Rightarrow$ O efeito de $\vec{B}$ é deslocar de U cada energia de uma orbital $E_n \to E_n + \mu_B B m_\ell$



níveis de energia de um átomo de H num campo magn.

Este desdobramento das linhas espectrais na presença de um campo magn. ext. foi observado em 1896 por Zeeman e por isto tem seu nome.

O spin do elétron §43.4

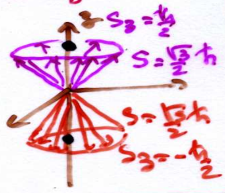
Os espectroscopistas encontraram outros desdobramentos dos níveis de energia, alguns com espaçamentos diferentes (≡ efeito Zeeman anormal). Havia também desdobramentos na ausência de campo magnético externo.

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: $2\ell+1$ 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 $\vec{L}$:

$$S = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar \quad \text{pois } s = 1/2$$

$$S_z = m_s \hbar = \pm \frac{\hbar}{2} \quad \text{pois } m_s = \pm 1/2$$



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

As vezes, considera-se que os 2 valores possíveis para m_s correspondem aos 2 sentidos de rotação do 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 $\mu_s = -2\frac{e}{2m}S_z$ 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

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

Na função de onda: $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\,\Theta(\theta)\,\Phi(\varphi)$, Θ e Φ 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 menor $n+l$; se o $n+l$ for o mesmo, primeiro vem a de menor n.
(existe exceções)

Graficamente:

	$l=0$	1	2	3	4
$n=1$	1s				
2	2s	2p			
3	3s	3p	3d		
4	4s	4p	4d	4f	
5	5s	5p	5d	5f	5g

(=> setas de $n+l$ fixo, sentido crescente)

Ordem de preenchimento das orbitais externas:
1s
2s
2p
3s
3p
4s
3d
etc

Preenchemos as orbitais de mesma energia com spins desaparelhados (regra de Hund... existe exceções também)

Assim obtemos:

		1s	2s	2p	configuração eletrônica
$Z=1$	H	↑			$1s^1$
2	He	↑↓			$1s^2$
3	Li	↑↓	↑		$1s^2 2s^1$
4	Be	↑↓	↑↓		$1s^2 2s^2$
5	B	↑↓	↑↓	↑	$1s^2 2s^2 2p^1$
6	C	↑↓	↑↓	↑ ↑	$1s^2 2s^2 2p^2$

etc.

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

He $1s^2$ completa + lacuna grande até a próxima subcam.
Ne $1s^2 2s^2 2p^6$ " " "
Ar $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ " " "
Kr
Xe
Rn

=> Estes elementos interagem pouco (gases nobres)

Formulário

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

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

$E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}, \quad \lambda' = \lambda + \lambda_0(1 - \cos\theta)$, onde $\lambda_0 = h/(m_0c)$.

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

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

$L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar,\ L_z = m_\ell\,\hbar,\ S = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar,\ S_z = m_s\,\hbar.$

7

Questão 4

Para preencher com elétrons as subcamadas de um átomo usa-se a regra: as subcamadas que têm o menor valor de $n + \ell$ são preenchidas antes; se duas subcamadas têm o mesmo valor de $n + \ell$, preenche-se antes a subcamada com menor valor de n.

(a) (1,5 ponto) Use a regra acima para escrever a configuração eletrônica do Sc, que é o elemento com número atômico mais baixo com um elétron na subcamada d.

(b) (1,0 ponto) Quais são os valores possíveis do módulo do momento angular e de sua componente z para o elétron d do Sc?

2009

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, ℓ, m_ℓ 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.

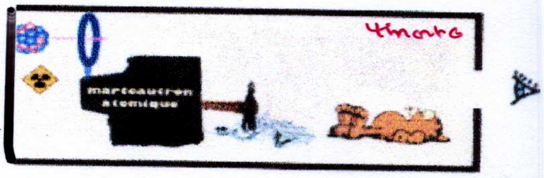
(b) (1,0 ponto) Numa transição entre dois estados o átomo de flúor permanece no estado de maior energia durante um intervalo de tempo $\Delta t = 2,5 \times 10^{-8}$ s antes de emitir um fóton e decair ao estado de menor energia. Qual é a incerteza mínima na energia em elétron-volts daquele estado de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

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

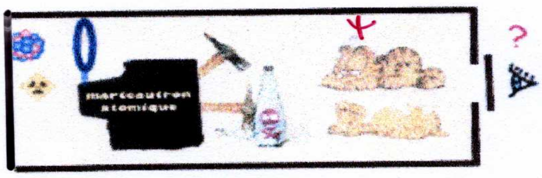
O gato de Schrödinger

Coloque um gato numa caixa, com um pouco de substância radiativa, uma quantidade tão pequena que após 1hora, tem probabilidade 50% de ter tido 1 decaimento, e 50% para o decaimento. Se há decaimento, o detetor registra isto e aciona um martel, o qual quebra um frasco de veneno e o infeliz gato morre. Assim após 1hora, a chance de o gato ser vivo é 50% e morto 50%.

A sua função de onda é: $\psi = \psi_{vivo} + \psi_{morto}$.



Ele é vivo <u>e</u> morto.



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

Da mesma maneira, quando olhamos após 1h, sabemos se o gato é vivo ou morto, ... até olharmos ele estava morto-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 detetor.

Outra explicação é que ambas as possibilidades "morto" e "vivo" 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.)