

Física Moderna II

Aula 03

Marcelo G Munhoz
Pellettron, sala 245, ramal 6940
munhoz@if.usp.br

Schroedinger X Bohr

- Qual a vantagem da teoria de Schroedinger sobre a teoria de Bohr do ponto de vista da observação da natureza?
- A teoria de Schroedinger consegue descrever melhor os observáveis?
- Um exame mais detalhado mostra que sim!!

Momento angular

- Um exemplo da superioridade da teoria de Schroedinger é o papel do momento angular nesses sistemas físicos
- Assim como a energia total, o momento angular é conservado em um sistema atômico de um elétron, visto que o potencial é esfericamente simétrico:

$$\vec{\tau} = \frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{r} \times \vec{F} = 0$$

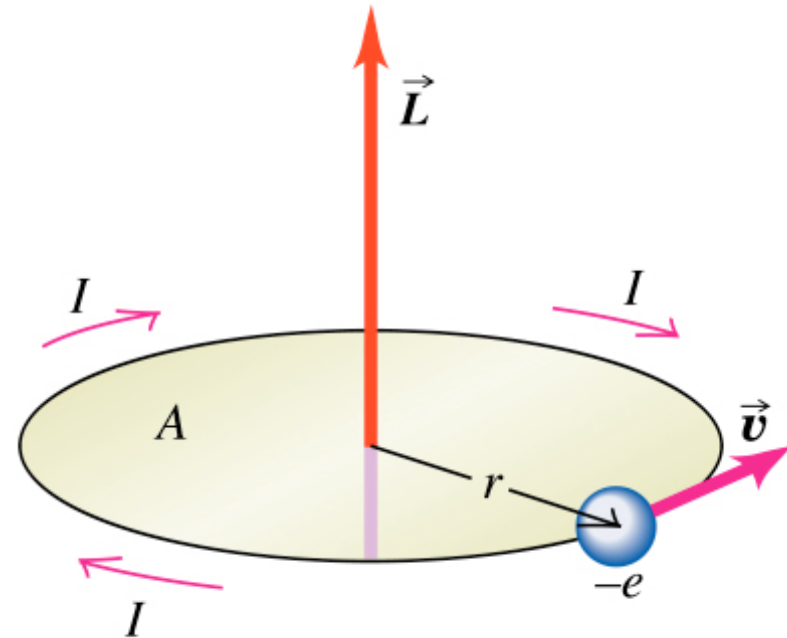
Momento angular orbital

- Podemos visualizar o momento angular que surge em um sistema atômico de uma maneira clássica:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

- No modelo de Bohr, deveríamos ter:

$$L = n\hbar$$



Copyright © Addison Wesley Longman, Inc.

Número Quântico do Momento Angular Orbital

- O índice l é chamado de número quântico do momento angular orbital ou número quântico azimutal
- Ele representa o valor esperado para o módulo do momento angular do elétron no átomo, ou seja:

$$\bar{L} = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

Número Quântico Magnético

- O índice m_l é de número quântico magnético
- Ele representa o valor esperado para uma das componentes do momento angular, normalmente atribuída ao eixo-z

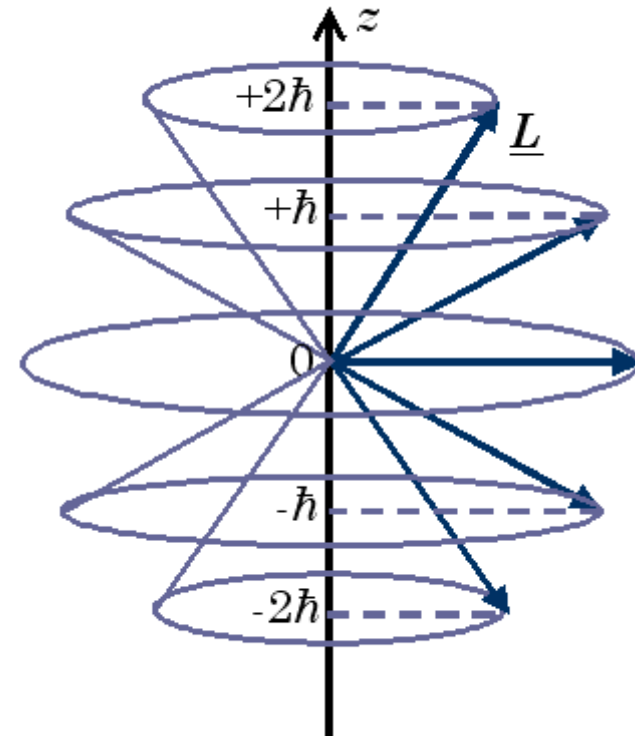
$$\bar{L}_z = \hbar \cdot m_l$$

Medida do momento angular

- É possível se medir o momento angular (as três componentes, L_x , L_y e L_z) de um elétron em um átomo? Por quê?
 - Quantitativamente, $\bar{L}_x = \bar{L}_y = 0$
 - Qualitativamente, se isso fosse possível, definiríamos a trajetória do elétron, que não é possível pelo princípio da incerteza

Quantização do momento angular

- Como $l(l+1)$ e m_l representam o momento angular, e esses números quânticos só podem assumir valores inteiros, concluímos que o momento angular também é quantizado
- Porém, essa quantização é diferente daquela proposta por Bohr



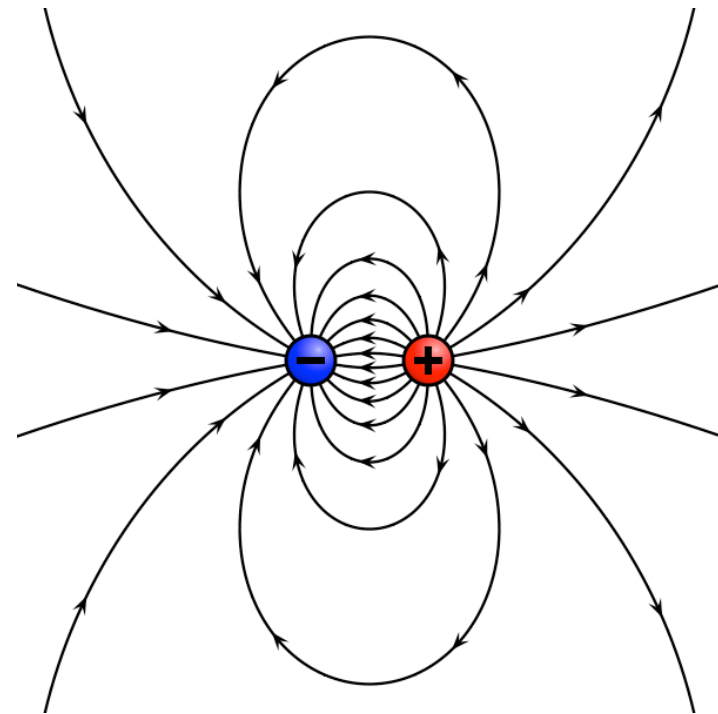
Momento angular

- Uma das consequências do momento angular do elétron em movimento dentro do átomo é o campo magnético que ele produz.
- Os efeitos desse campo magnético podem ser medidos e trazer informações sobre a estrutura atômica

Momento de dipolo elétrico

- Antes de discutirmos esses efeitos, vamos lembrar da definição de dipolo elétrico.
- Duas cargas de sinais opostos separadas por uma distância d , apresentam um momento de dipolo elétrico dado por:

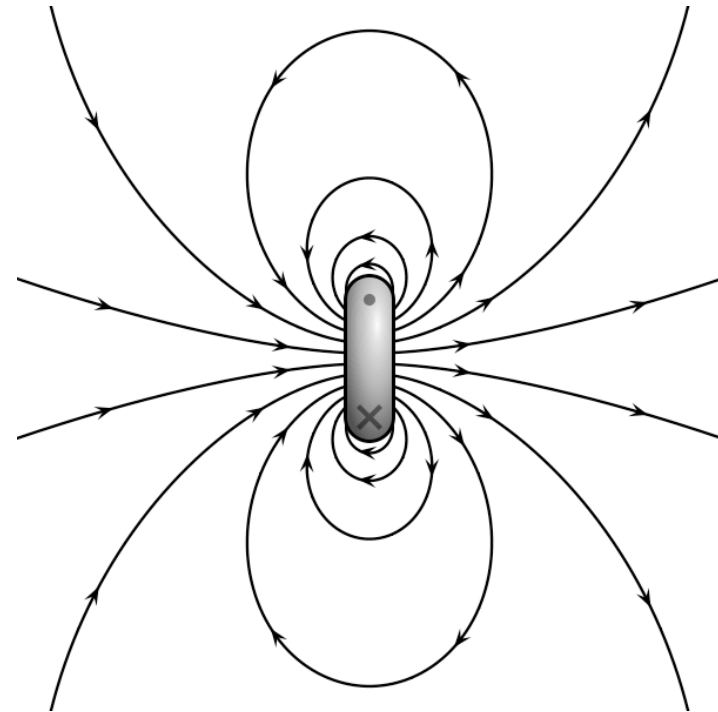
$$\vec{p} = q \cdot \vec{d}$$



Wikipedia, the free encyclopedia

Momento de dipolo magnético

- Uma espira que compreende uma área S por onde passa uma corrente elétrica i gera um campo magnético de características semelhantes ao campo elétrico gerado pelo dipolo elétrico.



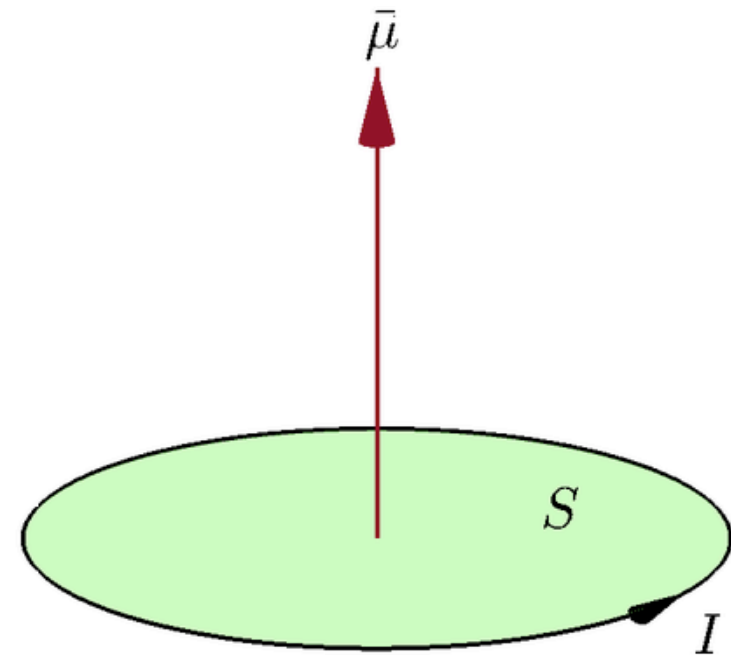
Wikipedia, the free encyclopedia

Momento de dipolo magnético

- Portanto, podemos definir um momento de dipolo magnético (μ) dado por:

$$\vec{\mu} = i \cdot \vec{S}$$

- onde a direção do momento de dipolo magnético é perpendicular à área S

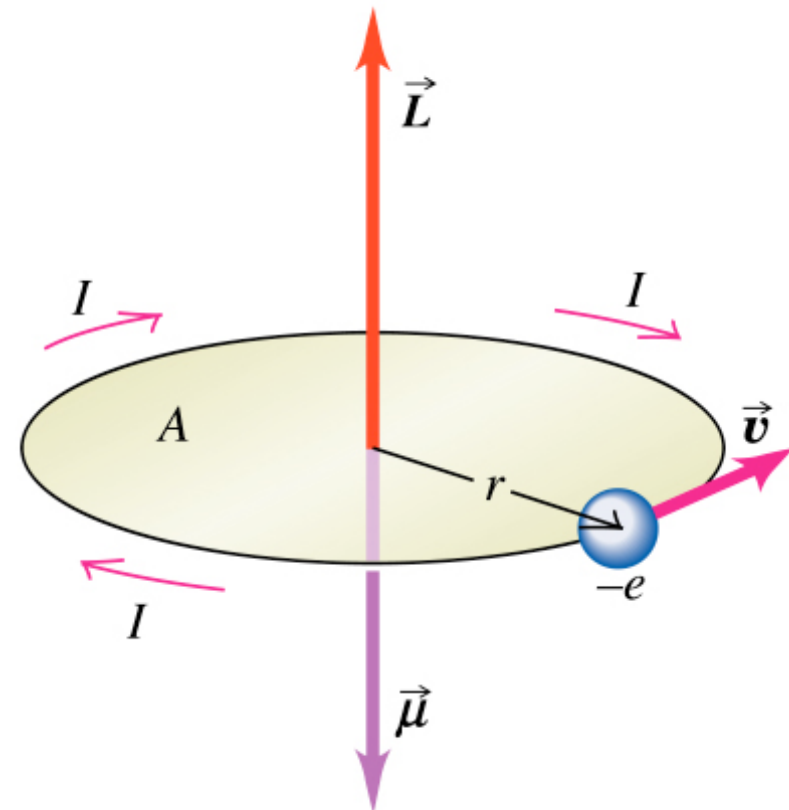


Wikipedia, the free encyclopedia

Momento de dipolo magnético orbital

- Um elétron em órbita gera uma corrente que, por sua vez, produz um campo magnético similar ao de um dipolo magnético.
- A corrente gerada pelo elétron é dada por:

$$I = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi r}$$

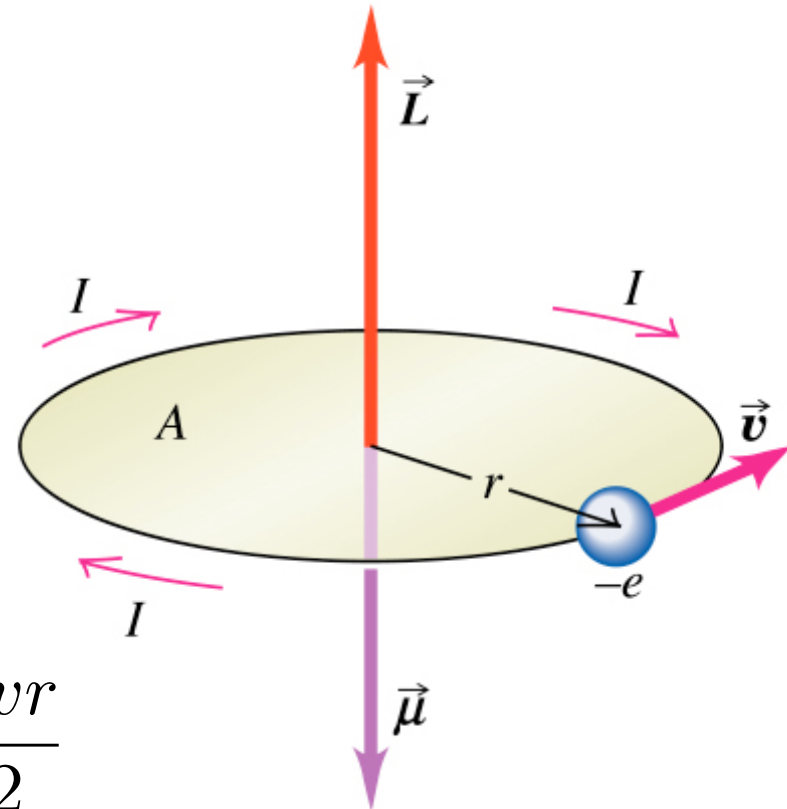


Copyright © Addison Wesley Longman, Inc.

Momento de dipolo magnético orbital

- Portanto, em uma aproximação semi-clássica, podemos dizer que o elétron em um átomo gera esse momento de dipolo magnético:

$$\mu = I \cdot A = \frac{ev}{2\pi r} \cdot \pi r^2 = \frac{evr}{2}$$



Copyright © Addison Wesley Longman, Inc.

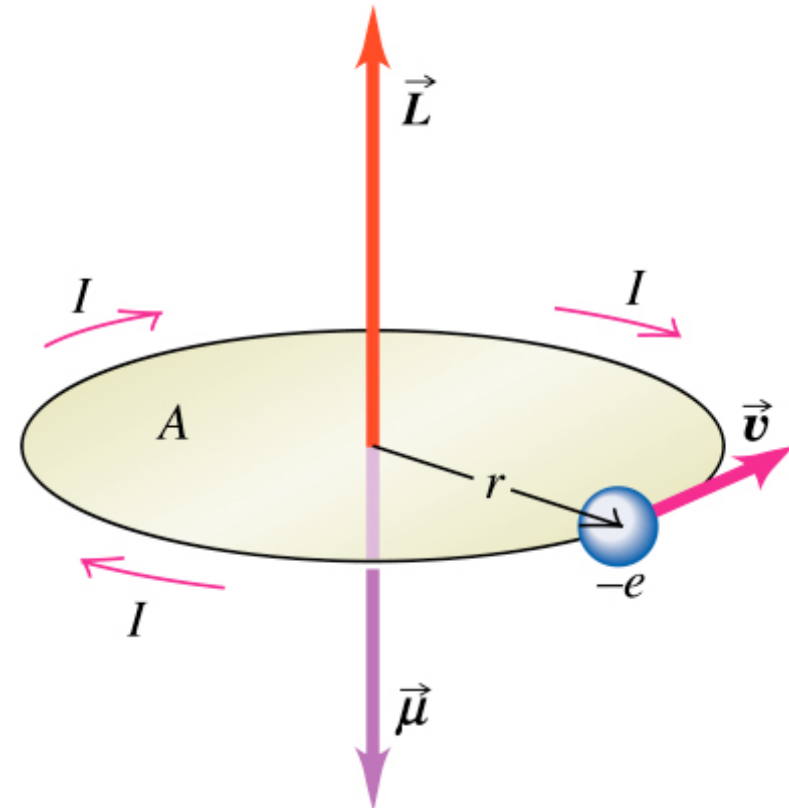
Momento de dipolo magnético orbital

- Podemos agora associar esse momento de dipolo magnético com o momento angular do elétron, que é dado por:

$$L = mvr$$

- Portanto:

$$\mu = \frac{e}{2m}L$$



Copyright © Addison Wesley Longman, Inc.

Momento de dipolo magnético orbital

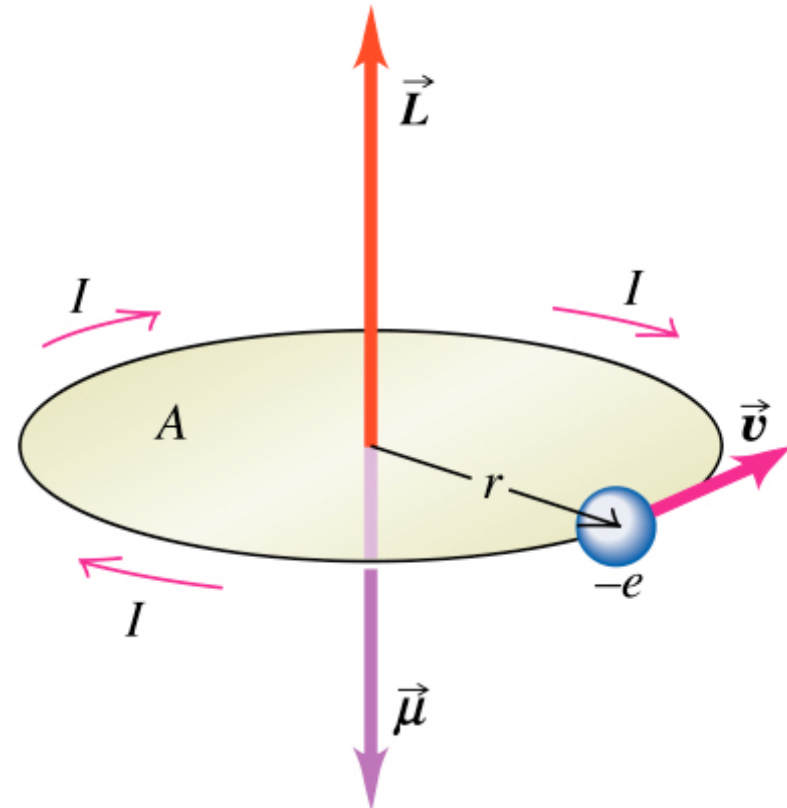
- Por convenção, escreve-se essa relação como:

$$\vec{\mu} = -\frac{g_l \mu_b}{\hbar} \vec{L}$$

- onde:

$$\mu_b = \frac{e\hbar}{2m}$$

- e $g_l = 1$



Copyright © Addison Wesley Longman, Inc.

Momento de dipolo magnético orbital

- Quanticamente, devemos lembrar que o valor esperado do momento angular é dado por:

$$\bar{L} = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

- Portanto, o valor esperado para o momento de dipolo magnético do elétron no átomo é dado por:

$$\bar{\mu}_l = \frac{g_l \mu_b}{\hbar} \cdot \hbar \sqrt{l(l+1)} = g_l \mu_b \cdot \sqrt{l(l+1)}$$

Momento de dipolo magnético orbital

- De forma semelhante, a componente z do momento angular é dada por:

$$\bar{L}_z = \hbar \cdot m_l$$

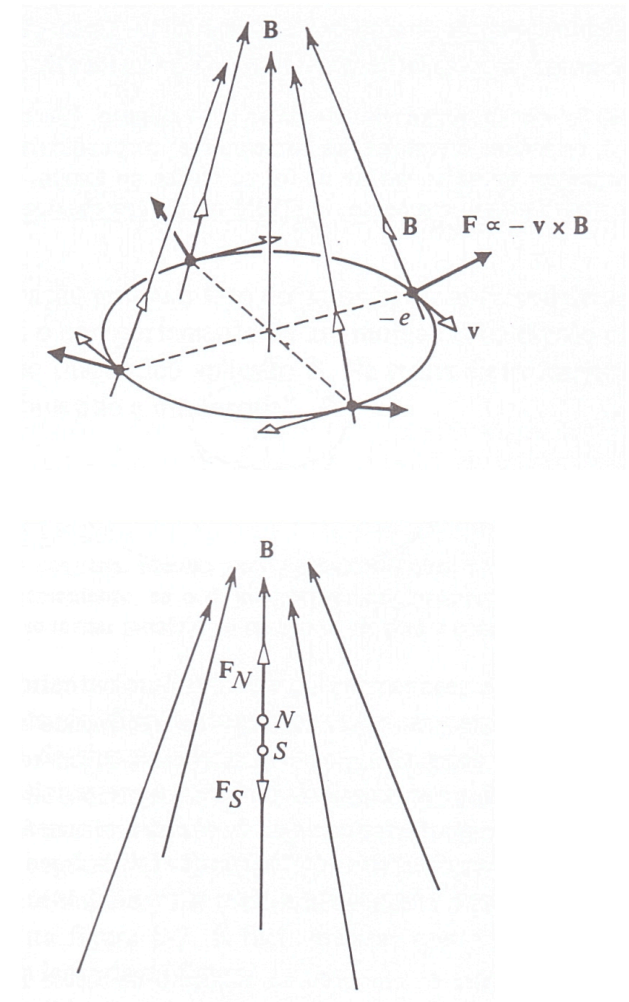
- Portanto, o valor esperado para a componente z do momento de dipolo magnético do elétron no átomo é dado por:

$$\bar{\mu}_z = \frac{g_l \mu_b}{\hbar} \cdot \bar{L}_z = \frac{g_l \mu_b}{\hbar} \cdot \hbar \cdot m_l = g_l \mu_b \cdot m_l$$

Comportamento de um dipolo em um campo magnético

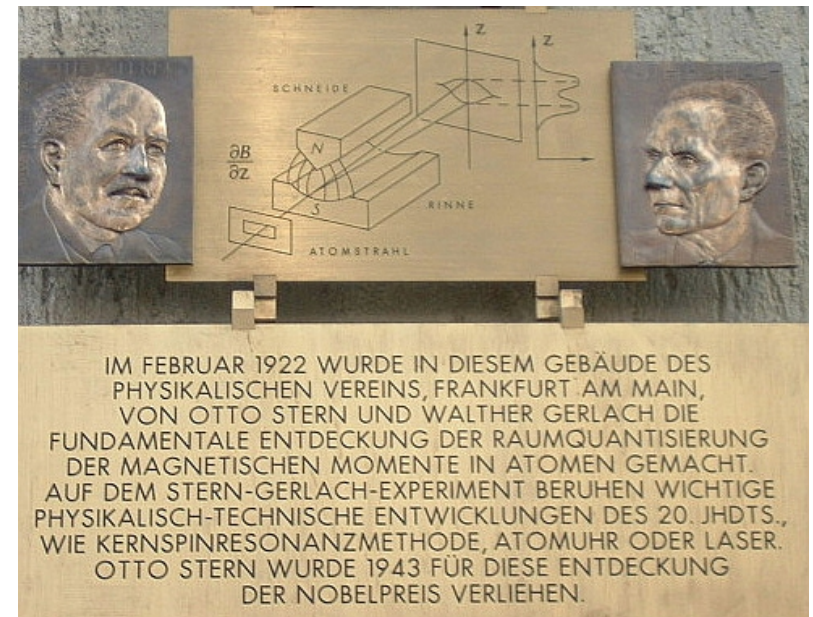
- Quando um dipolo magnético qualquer é colocado na presença de um campo magnético não uniforme, surge uma força média na direção \mathbf{z} agindo no elétron durante sua órbita dada por:

$$\bar{F}_z = \frac{\partial B_z}{\partial z} \cdot \mu_z$$



O experimento de Stern e Gerlach

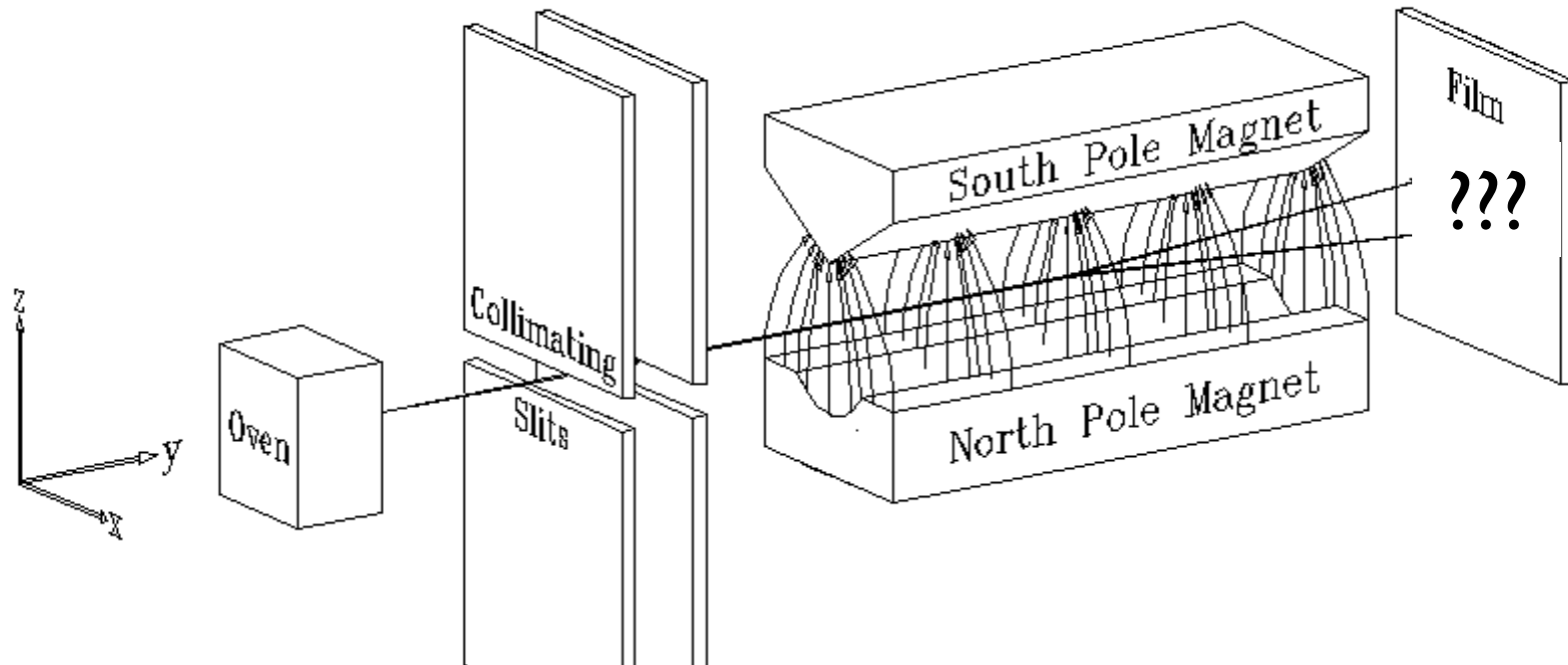
- Em 1922, Stern e Gerlach realizaram um experimento para medir o momento magnético de átomos devido aos seus elétrons.



Placa comemorativa no Instituto de Física da FFM (Frankfurt)

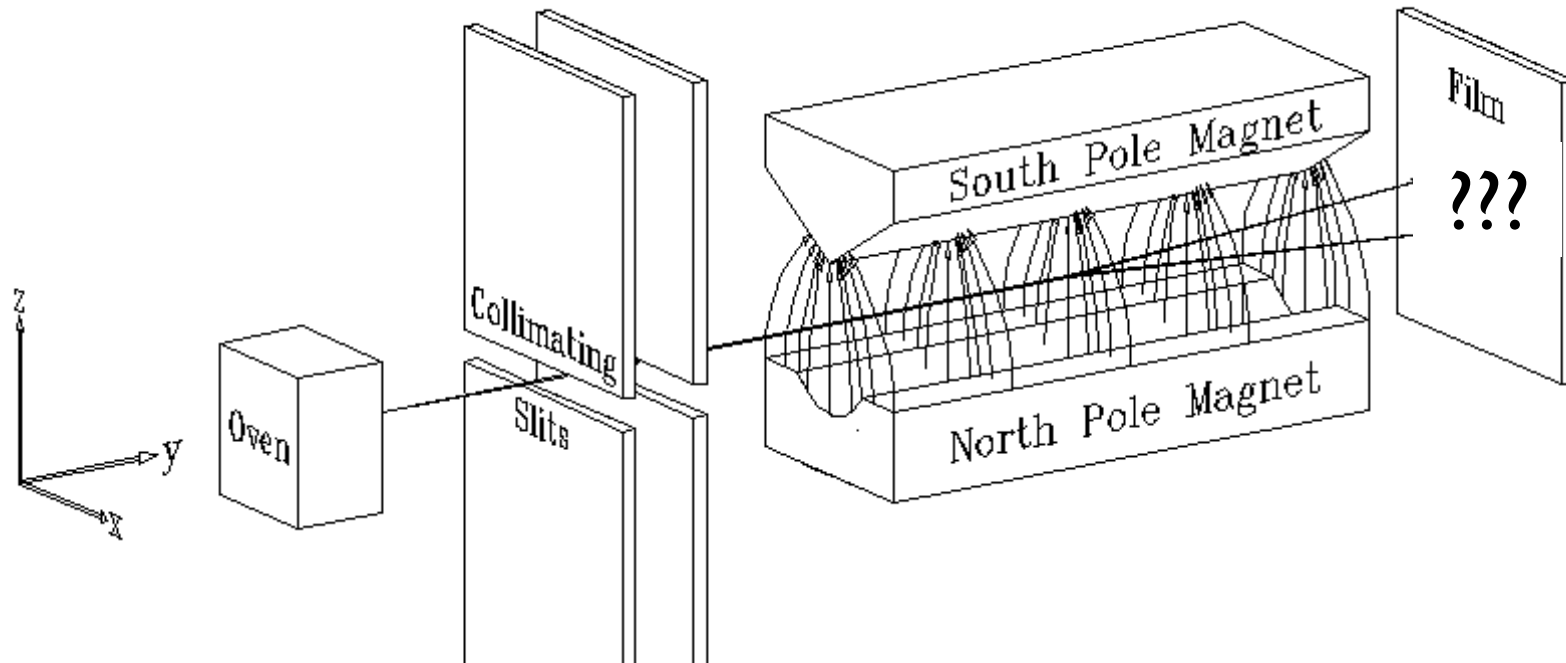
Wikipedia, the free encyclopedia

O experimento de Stern e Gerlach



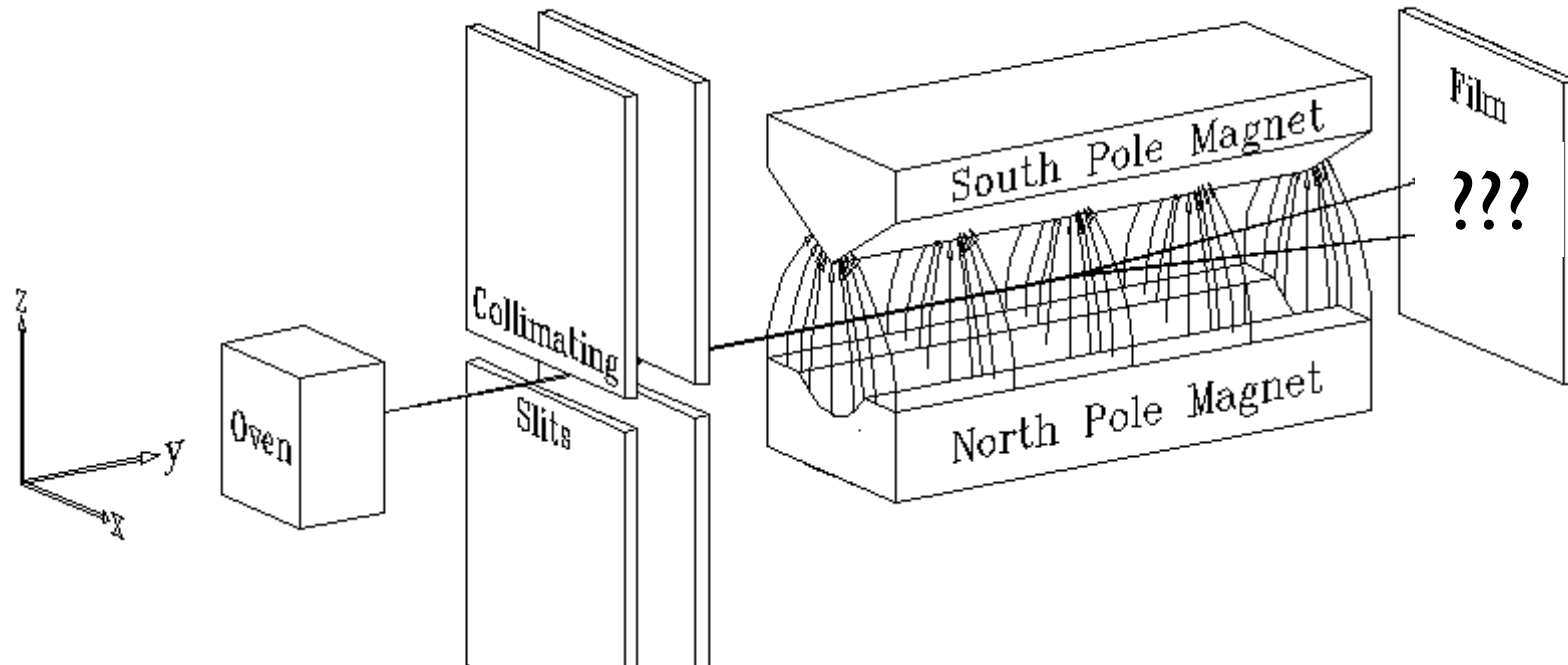
- Eles fizeram átomos de prata atravessarem um campo magnético não uniforme e mediram o efeito desse campo na trajetória dos átomos

O experimento de Stern e Gerlach



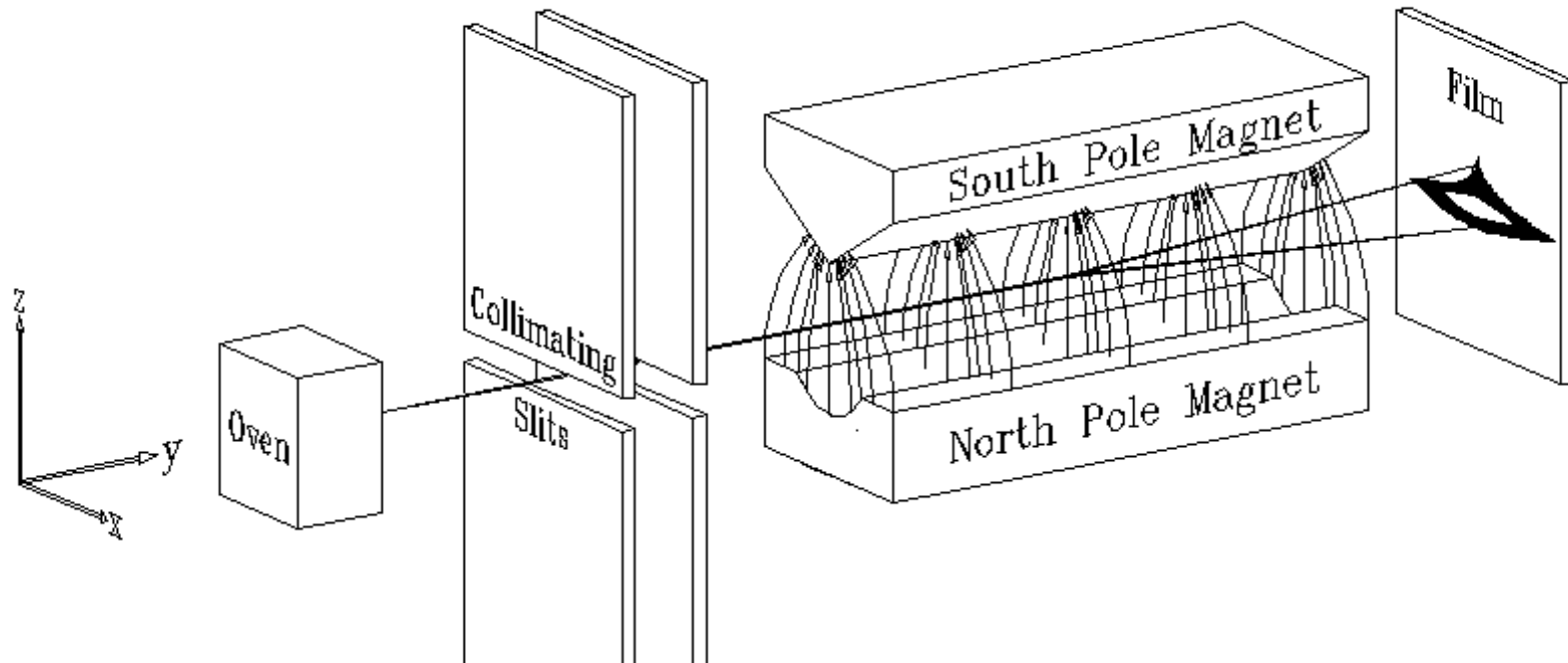
- Segundo a física clássica, deveria surgir uma distribuição uniforme de átomos no filme, uma vez que a força é proporcional a componente z do momento de dipolo magnético e os átomos podem ter qualquer orientação

O experimento de Stern e Gerlach



- Quanticamente, espera-se linhas discretas, pois:
$$\bar{\mu}_z = g_l \mu_b \cdot m_l$$
- e, $m_l = -l, -l+1, \dots, l+1, l$

O experimento de Stern e Gerlach



- Porém, o que se observou foram **sempre** apenas duas linhas, independente do valor de l dos átomos utilizados!! Em 1927, por exemplo, Phipps e Taylor reproduziram o experimento com átomos de H ($l=0$) e obtiveram o mesmo resultado.

O experimento de Stern e Gerlach

- Como explicar essa observação?
- Ela parece estar qualitativamente de acordo com a previsão da física quântica (linhas discretas), mas com algumas inconsistências (apenas duas!)

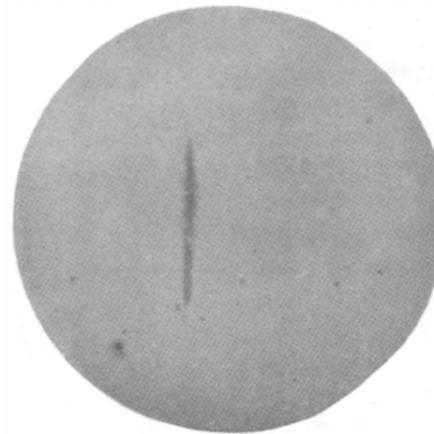


Fig. 2.

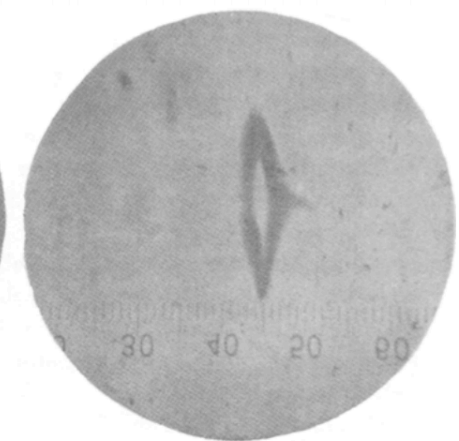


Fig. 3.

Walther Gerlach, Otto Stern, "Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld," Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei, Vol 9, No. 1, 349-352, 1922

A descoberta do *spin* do elétron

- A hipótese que melhor explica essa observação é supor que há um outro momento angular associado aos elétrons (**S**) que gera um momento de dipolo magnético (μ_S) e cuja componente z só pode ter dois valores.

A descoberta do *spin* do elétron

- Portanto, se $\bar{S} = \hbar\sqrt{s(s+1)}$ que leva a $\bar{S}_z = \hbar m_S$
- e $s = 1/2$ que leva a $m_S = -1/2$ e $+1/2$
- chega-se aos resultados observados no experimento, com $g_S = 2$

A descoberta do *spin* do elétron

- Mas afinal, o que é o *spin* do elétron?
- Ele é compatível com uma rotação dessa partícula em torno do próprio eixo? Por quê?

A descoberta do *spin* do elétron

- Como o elétron apresenta um momento angular intrínseco e, por consequência, apresenta um momento de dipolo magnético intrínseco (e não devido ao seu movimento orbital) dado por:

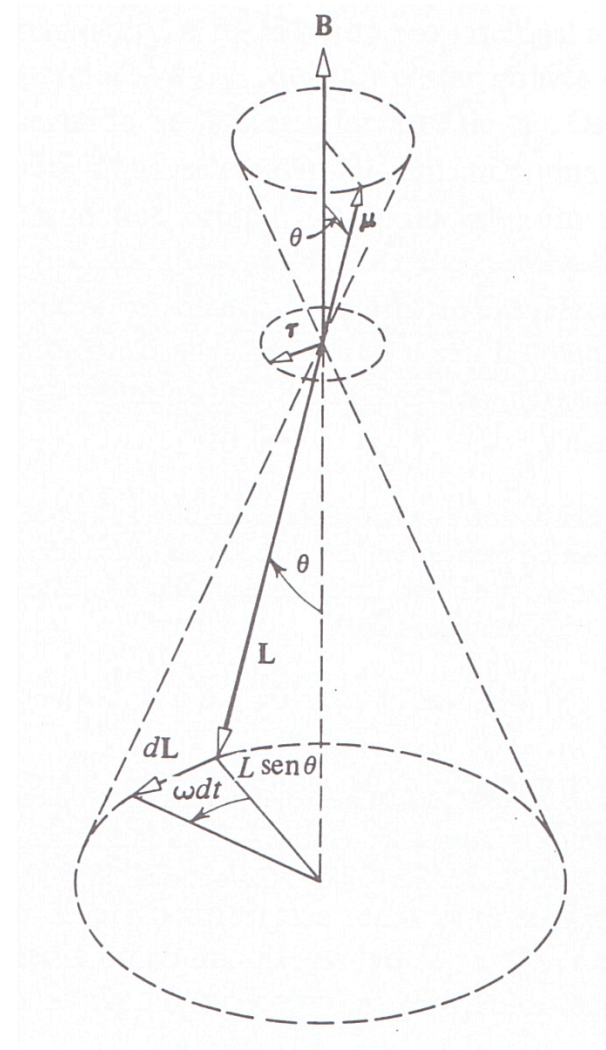
$$\vec{\mu}_S = -\frac{g_s \mu_B}{\hbar} \vec{S}$$

- deve surgir uma interação entre esse momento de dipolo magnético intrínseco e o campo magnético gerado pelo movimento do elétron em torno do núcleo

Comportamento de um dipolo em um campo magnético

- Quando um dipolo magnético qualquer é colocado na presença de um campo magnético uniforme, o mesmo fica submetido a um torque dado por:

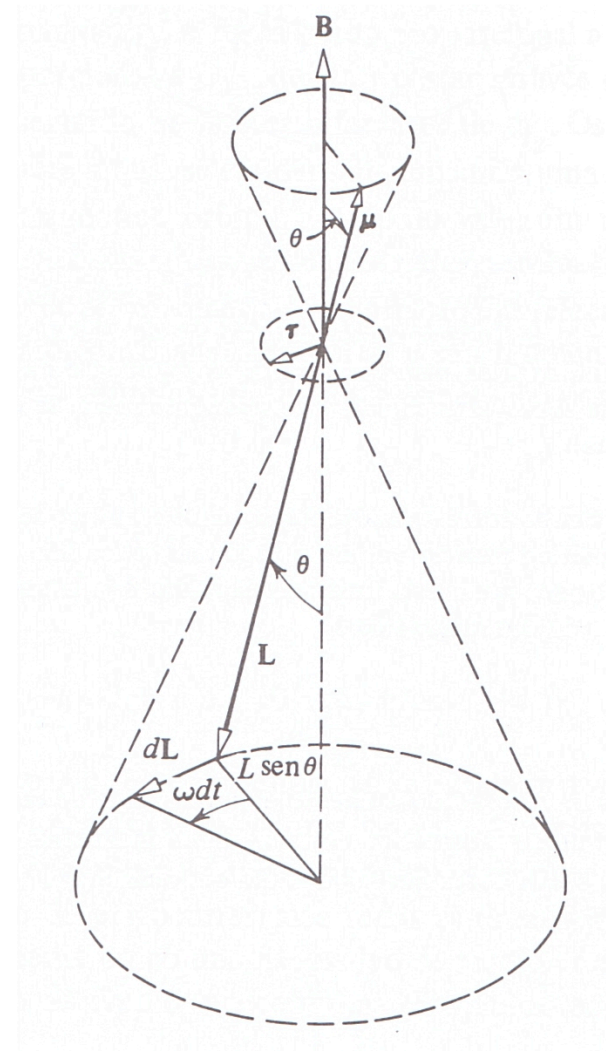
$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$



Comportamento de um dipolo em um campo magnético

- O resultado desse torque é um movimento de precessão do momento de dipolo magnético, mantendo seu módulo e ângulo com o campo magnético constantes.
- A frequência de precessão é dada por:

$$\omega = \frac{g\mu_b}{\hbar} \cdot B$$

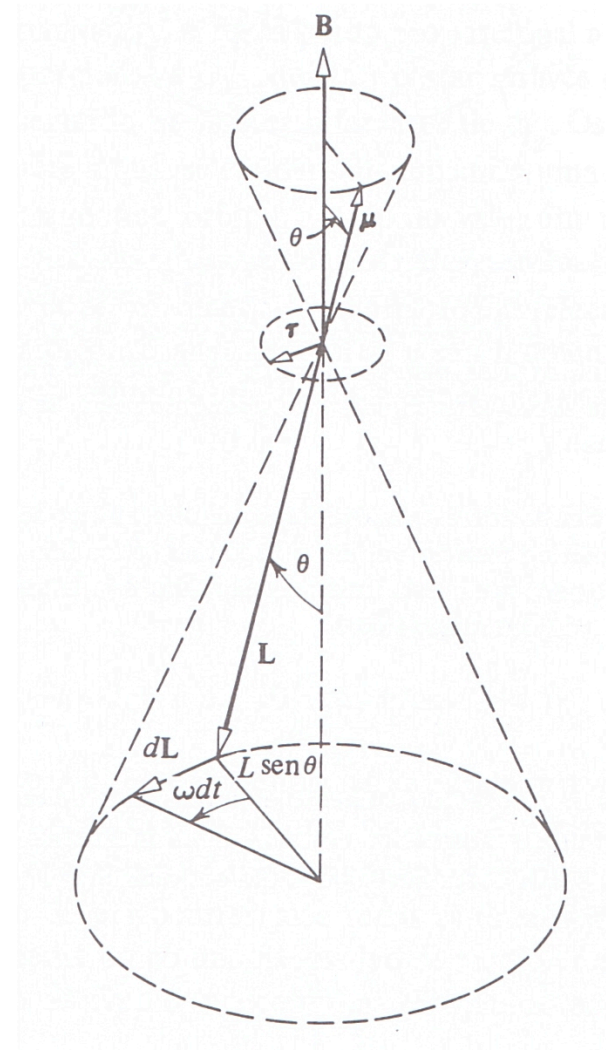


Comportamento de um dipolo em um campo magnético

- Essa interação leva a um energia potencial de “orientação” dada por:

$$\Delta E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

- Portanto, o sistema tenderá a ter o momento de dipolo magnético alinhado ao campo, que só ocorrerá se houver algum agente externo

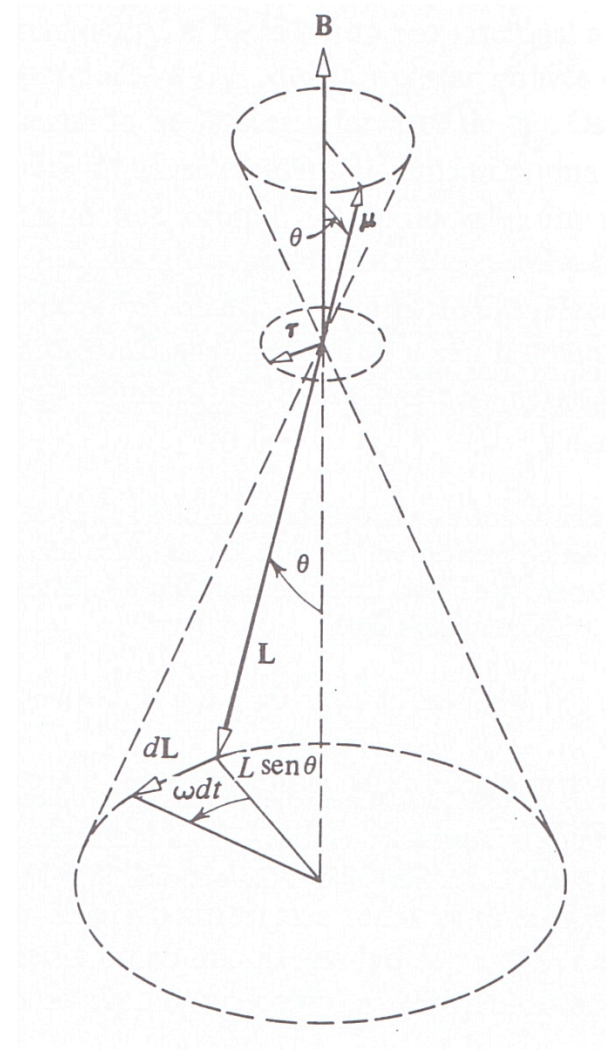


Interação *Spin*-Órbita

- No caso da interação do *spin* do elétron com o campo magnético gerado pelo seu movimento em torno do núcleo, teremos:

$$\Delta E = -\frac{\vec{\mu}_S \cdot \vec{B}}{2}$$

- Ou seja, um fator 2 é incluído devido às transformações relativísticas



Interação *Spin*-Órbita

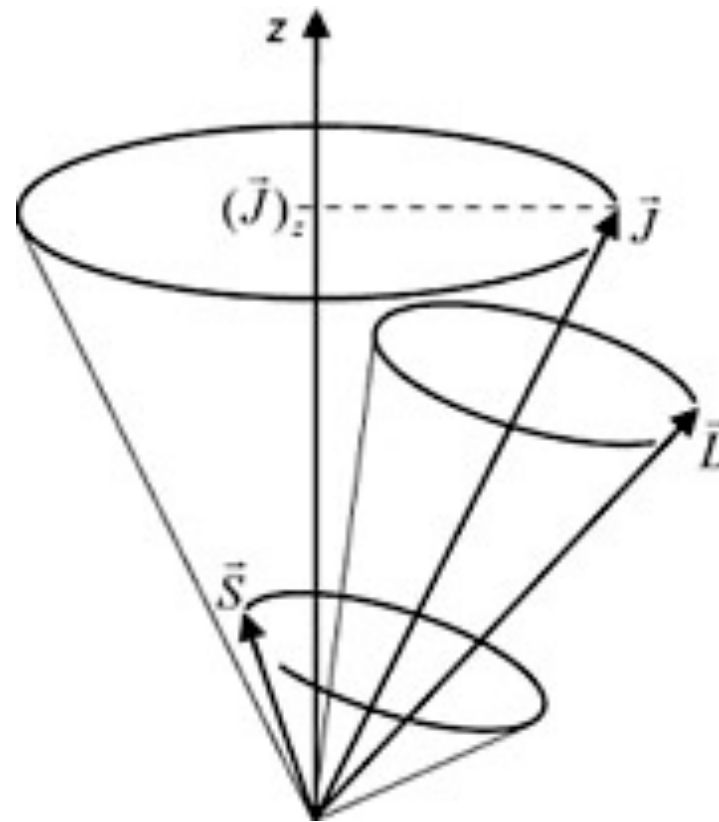
- Essa interação é chamada de interação *spin*-órbita, cuja energia potencial associada é dada por:

$$\Delta E = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{S} \cdot \vec{L}$$

- Essa interação é muito importante para compreendermos melhor os níveis de energia do átomo de H

Momento angular total

- Devido à existência desse momento angular intrínseco do elétron e sua interação spin-órbita, o comportamento do momento angular orbital depende do comportamento do spin e vice-versa
- O problema pode ser simplificado se definirmos um momento angular total, que apresentará um comportamento mais simples



Max Planck Institute for Nuclear Physics

Momento angular total

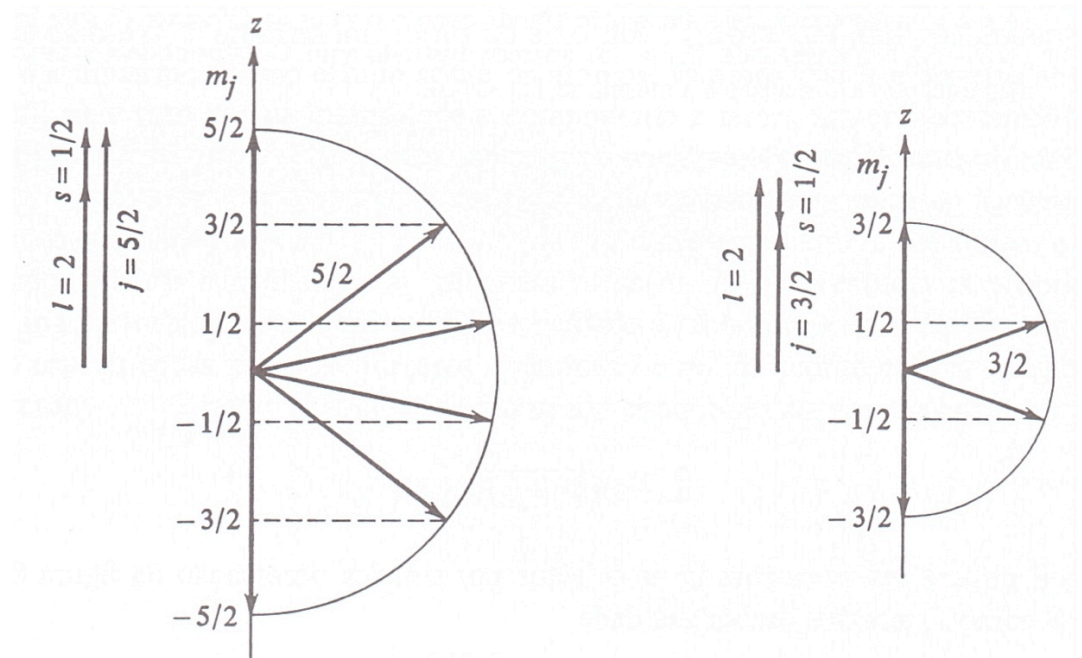
- O momento angular total é dado por:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

- Quanticamente, temos que:

$$j = l + 1/2 \text{ ou } j = l - 1/2 \text{ e}$$

$$m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$$

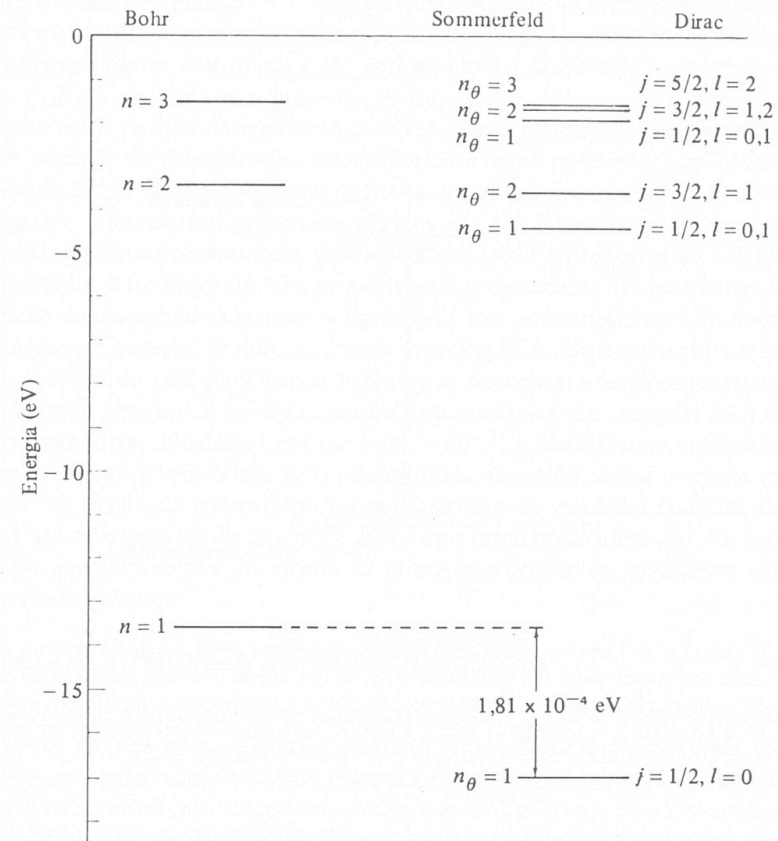


Schroedinger X Bohr

- Qual a vantagem da teoria de Schroedinger sobre a teoria de Bohr do ponto de vista da observação da natureza?
- A teoria de Schroedinger consegue descrever melhor os observáveis?
- Um exame mais detalhado mostra que sim!!

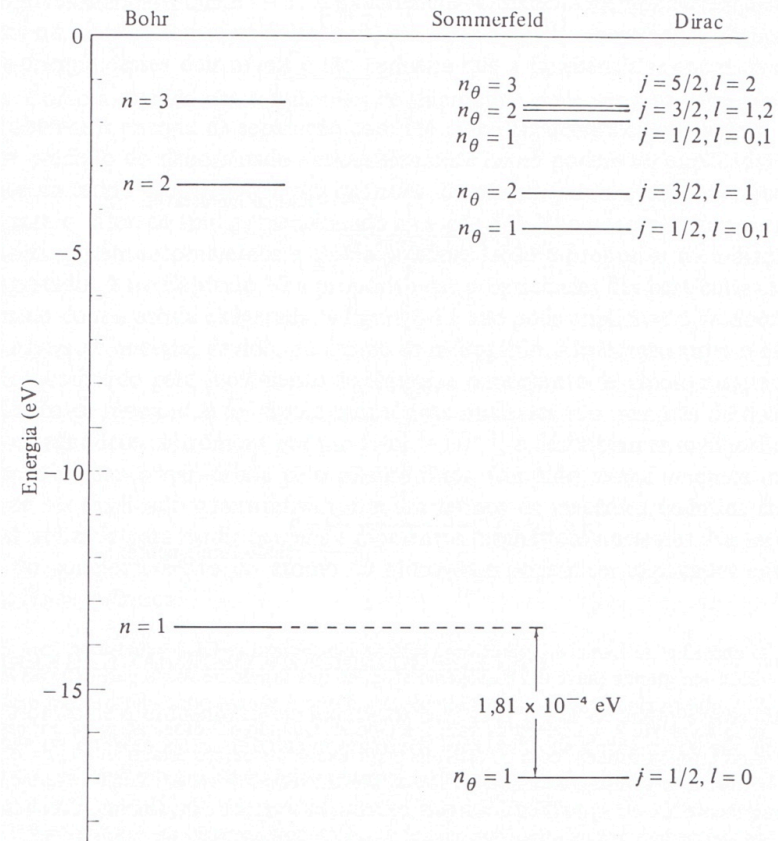
Schroedinger X Bohr

- Os níveis de energia previstos pela teoria de Schroedinger são equivalentes aos da teoria de Bohr e ambas teorias não conseguem prever todos os níveis observados!
- E agora?



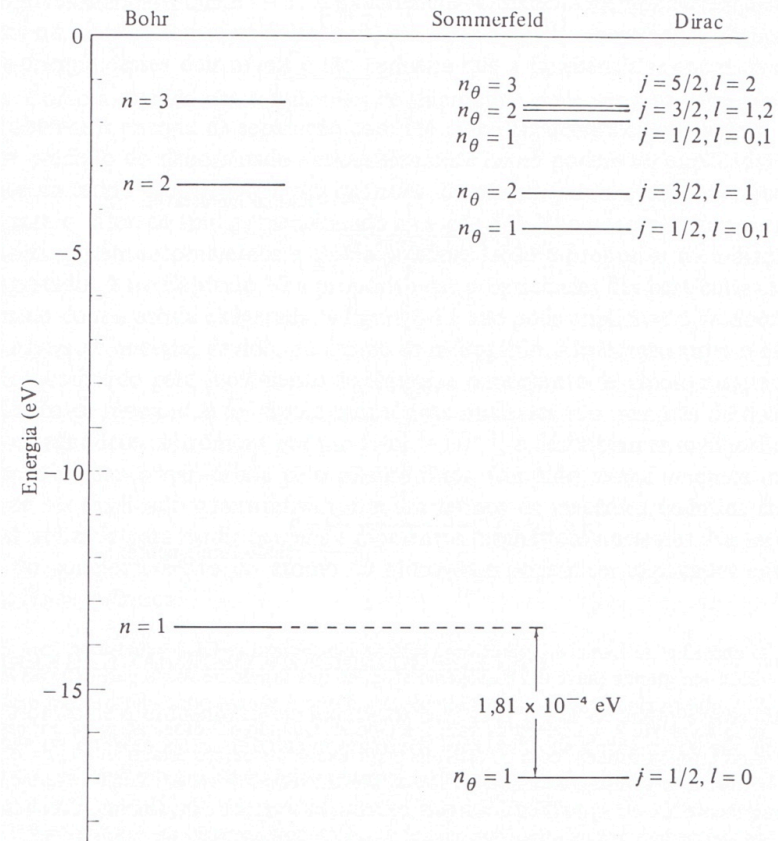
Schroedinger X Bohr

- Será que a interação spin-órbita tem algum efeito sobre os níveis de energia dos átomos?
- Será que essa interação explica as diferenças?
- Como podemos “enxergar” isso quanticamente?



Schroedinger X Bohr

- A descrição mais exata desses níveis de energia só pode ser obtida com a teoria de Dirac, mas a teoria de Schroedinger já aponta o caminho certo, ao evidenciar a dependência da energia com o acoplamento *spin-órbita*



$$E = -\frac{\mu e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$