

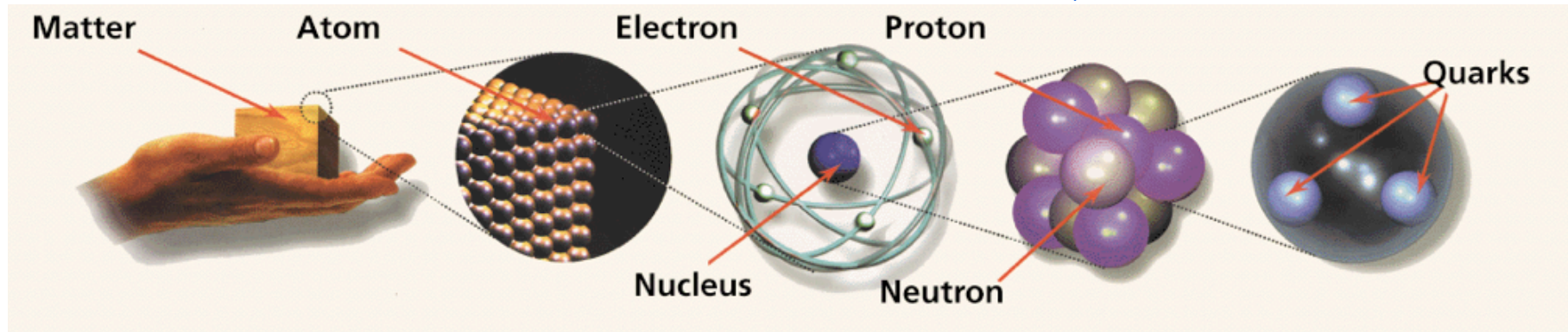
# Física Moderna II

## Aula 06

Marcelo G Munhoz  
Pelletron, sala 245, ramal 6940  
[munhoz@if.usp.br](mailto:munhoz@if.usp.br)

# Física Moderna II

Particle Physics Education CD-ROM ©1999 CERN



Sólidos

Átomos de 1 e<sup>-</sup>

Núcleo  
Atômico

Partículas  
Elementares

↓  
Átomos de 2 e<sup>-</sup>

↓  
Átomos de muitos e<sup>-</sup>

↓  
Moléculas

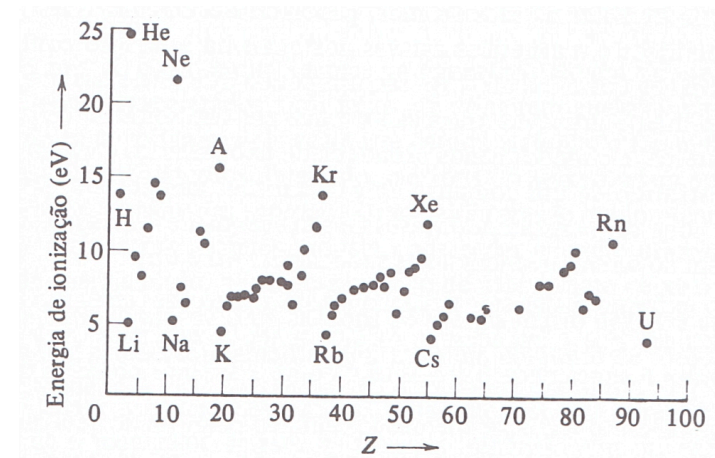
# Moléculas

- Moléculas podem ser pensadas como:
  - uma associação de dois ou mais átomos. Neste caso, os átomos mantêm sua “individualidade” e os elétrons das camadas mais externas que são os principais responsáveis pela força interatômica
  - um grupo de elétrons e núcleos. Neste caso, devemos considerar a função de onda do sistema como um todo

# Ligação Iônica

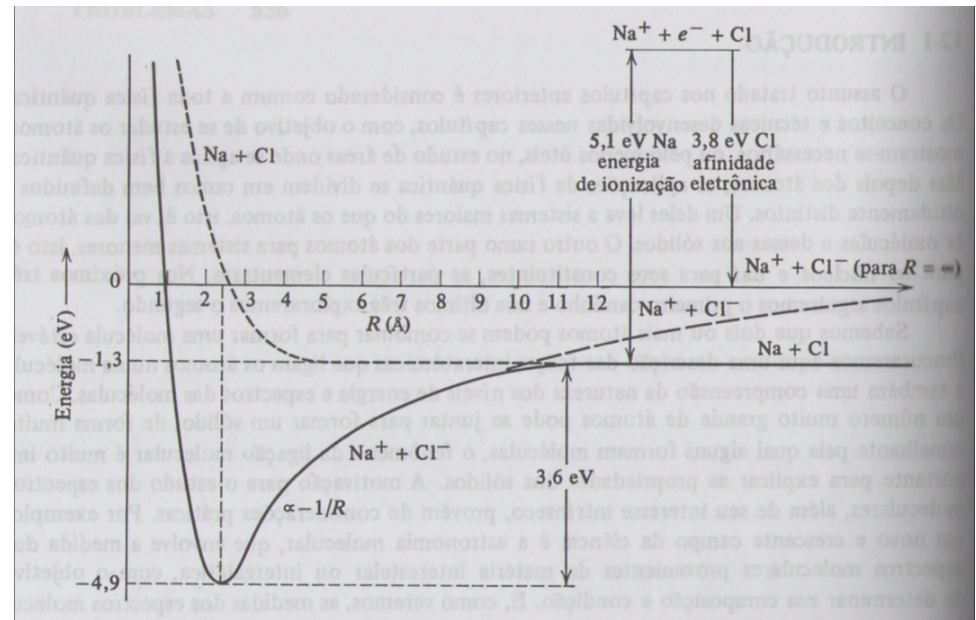
- Exemplo: NaCl
- O Na é um elemento alcalino: “doa” facilmente seu elétron mais externo (camada 3s)
- O Cl é um halogênio. Com um elétron a mais, completa sua camada 3p, tornando-se mais estável

Números Quânticos $n, l$	Nome da Subcamada	Capacidade da Subcamada $2(2l + 1)$
—	—	—
6,2	6d	10
5,3	5f	14
7,0	7s	2
6,1	6p	6
5,2	5d	10
4,3	4f	14
6,0	6s	2
5,1	5p	6
4,2	4d	10
5,0	5s	2
4,1	4p	6
3,2	3d	10
4,0	4s	2
3,1	3p	6
3,0	3s	2
2,1	2p	6
2,0	2s	2
1,0	1s	2



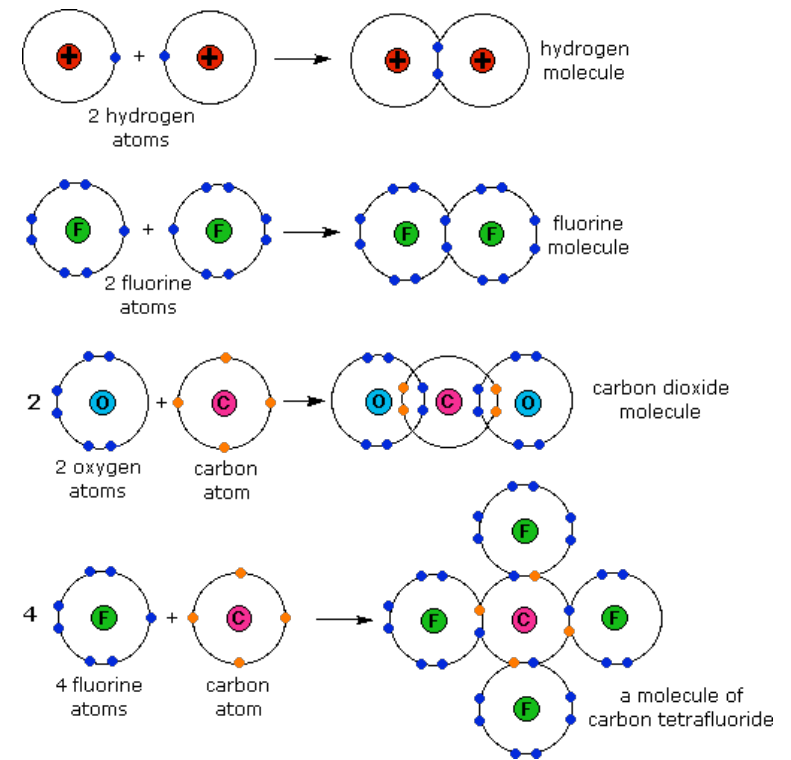
# Ligação Iônica

- Exemplo: NaCl
- Neste tipo de molécula, há uma distância entre os dois íons que torna mais favorável energeticamente ter os dois íons ligados do que separados
- Neste caso, essa distância é  $2.4 \text{ \AA}$



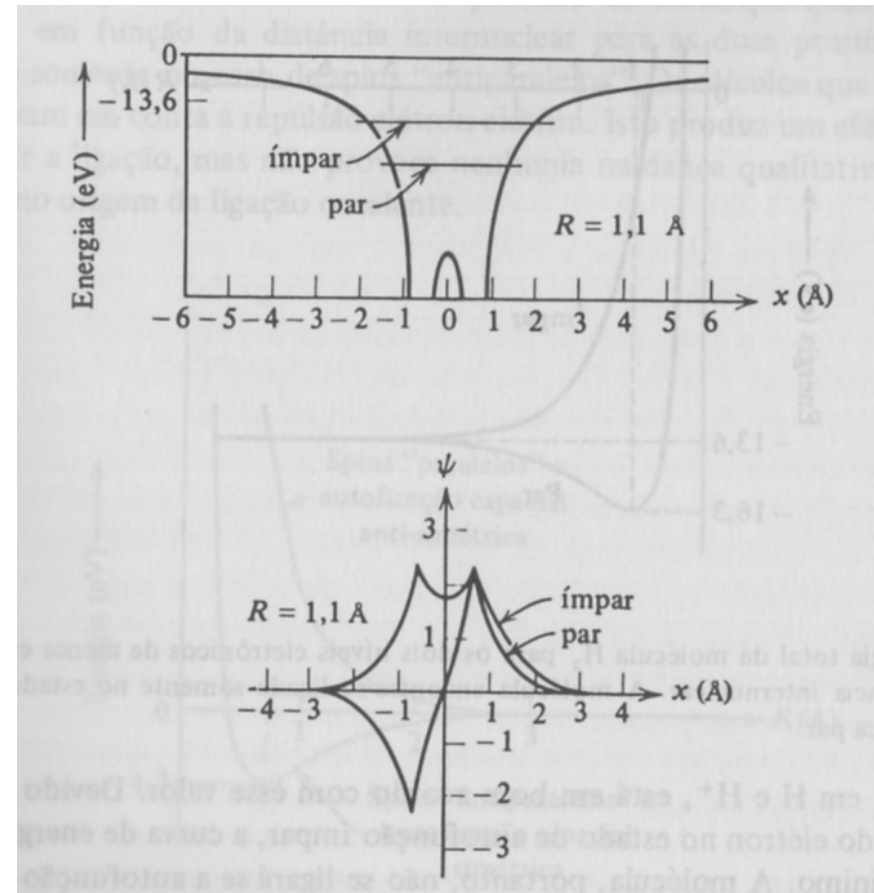
# Ligação Covalente

- Neste tipo de ligação, interpreta-se os elétrons como se fossem comuns aos dois átomos
- A ligação ocorre por conta do “emparelhamento” dos elétrons dos diferentes átomos



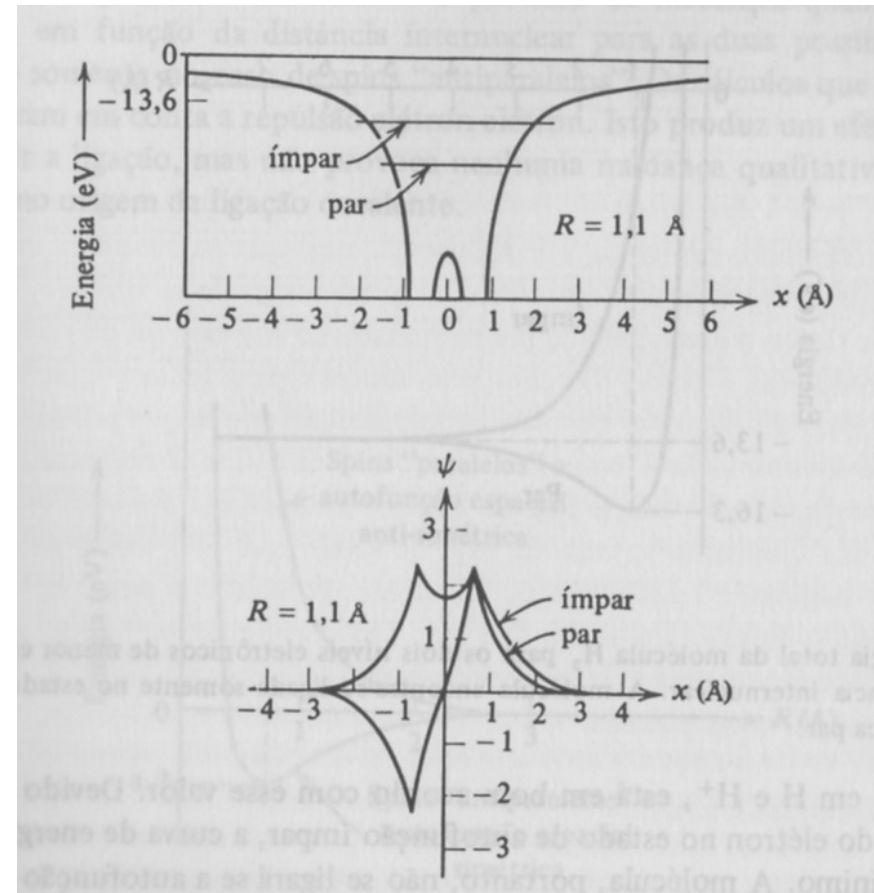
# Ligação Covalente

- Se a parte espacial da função de onda dos elétrons mais externos for simétrica (par), os elétrons terão alta probabilidade de se encontrarem entre os núcleos
- Se a parte espacial da função de onda desses elétrons for anti-simétrica (ímpar), essa probabilidade será nula



# Ligação Covalente

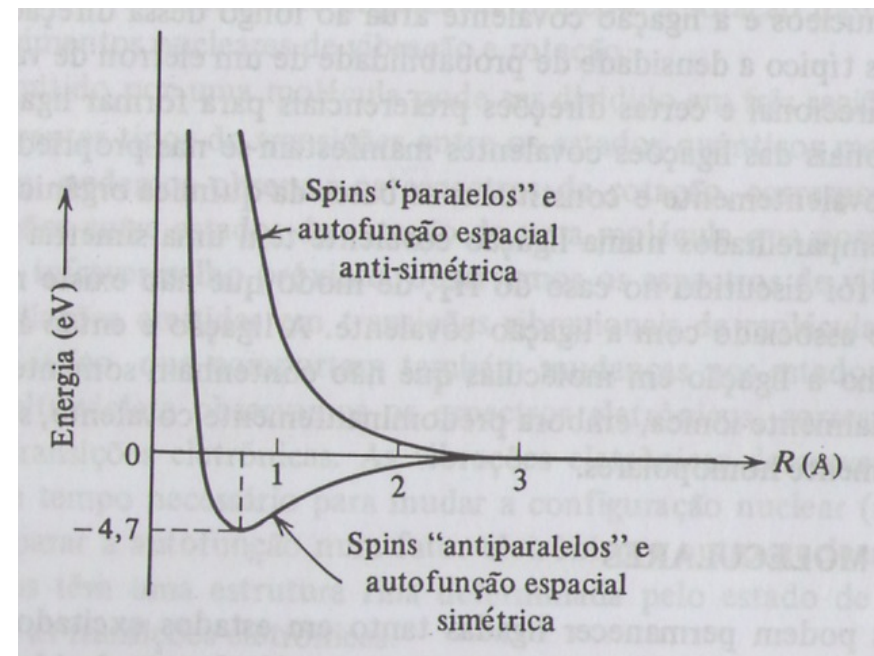
- A energia potencial do sistema é dada pela energia de atração dos elétrons com o núcleo e a repulsão entre os núcleos
- Se os elétrons estiverem entre os núcleos, a energia potencial do sistema será mínima, portanto poderá formar um estado ligado (molécula)





# Ligação Covalente

- Portanto, para o elétron estar entre os núcleos, minimizando a energia, a função de onda espacial deve ser simétrica
- Se a função de onda espacial for simétrica, a parte de *spin* deve ser anti-simétrica, ou seja, os *spins* devem estar “antiparelos”
- Neste caso, as propriedades de simetria da função de onda são muito importantes



# Espectros Moleculares

- Moléculas apresentam níveis de energia, como os átomos
- Porém, o diagrama de níveis é mais complicado
- Deve-se considerar, por exemplo, que o momento angular dos elétrons não é conservado e que o movimento dos núcleos é importante

# Espectros Moleculares

- Resultados empíricos mostram que podemos compreender a energia de uma molécula devido a três fatores: eletrônico (devido aos elétrons), vibracional e rotacional (devido aos núcleos)
- Cada estado eletrônico (devido a um configuração do elétrons), apresenta níveis de energia devido a vibração dos núcleos, que por sua vez, se dividem em outros níveis devido à rotação dos núcleos

# Espectros de Rotação

- Classicamente, a energia devido ao movimento de rotação de um corpo rígido é dada por:

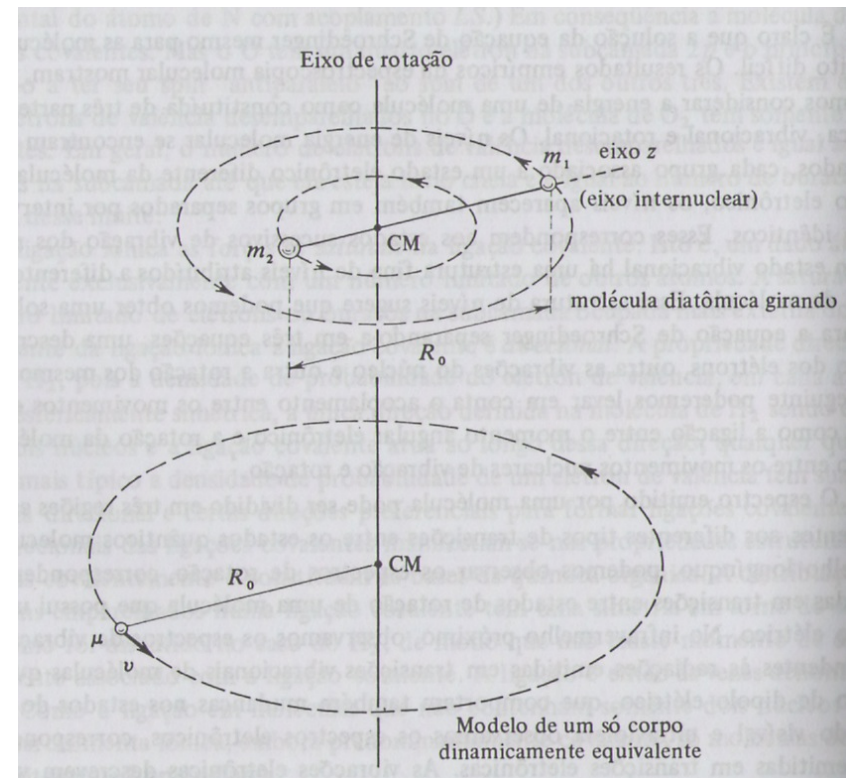
$$E_r = \frac{L^2}{2I}$$

- Quanticamente, tem-se que:

$$\bar{E}_r = \frac{\hbar^2}{2I} r(r + 1)$$

- onde  $r = 0, 1, 2, \dots$  e que leva a:

$$\Delta E_r = E_r - E_{r-1} = \frac{\hbar^2}{I} r$$



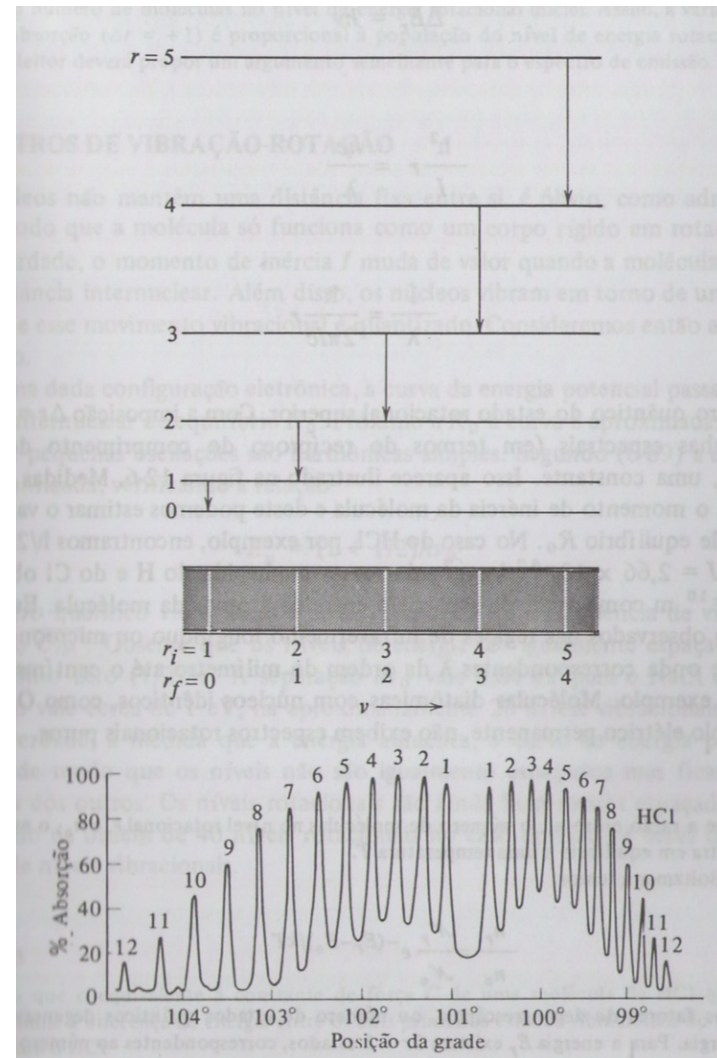
# Espectros de Rotação

- No caso da molécula formar um dipolo elétrico, esse movimento de rotação permite a emissão e absorção de radiação eletromagnética, sendo:

$$\Delta E_r = \frac{\hbar^2}{I} r = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

- que leva a uma diferença entre comprimentos de onda consecutivos dada por:

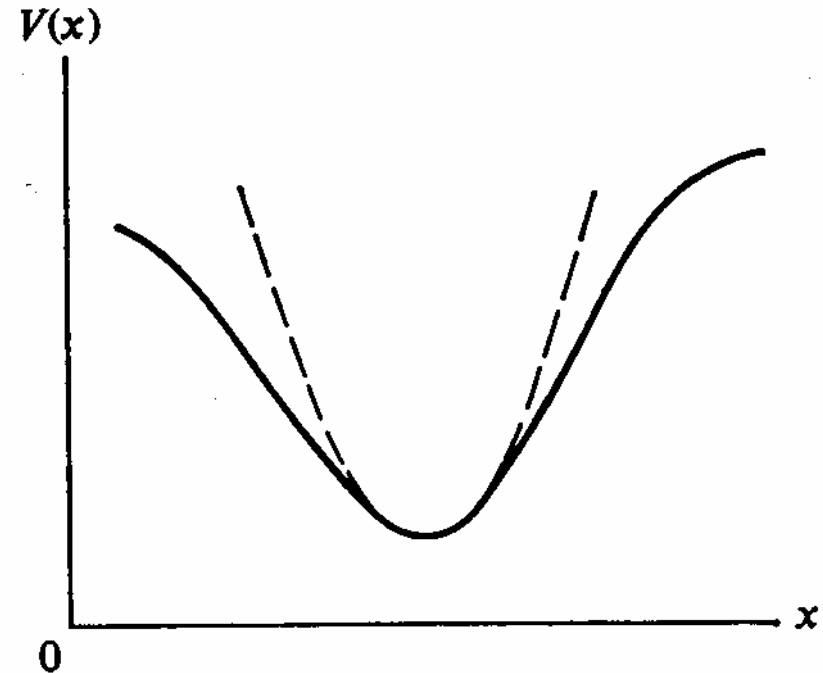
$$\Delta \left( \frac{1}{\lambda} \right) = \frac{\hbar}{2\pi I c}$$



# Oscilador Harmônico

- O oscilador harmônico é de extrema importância na física pois é um protótipo de qualquer sistema que envolva oscilações
- Para pequenas oscilações, normalmente, pode-se aproximar o potencial para:

$$V(x) = \frac{C}{2}x^2$$



# Oscilador Harmônico

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

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\nu$$

$$\psi_n(x) = H_n[u(x)]e^{-u(x)^2/2}$$

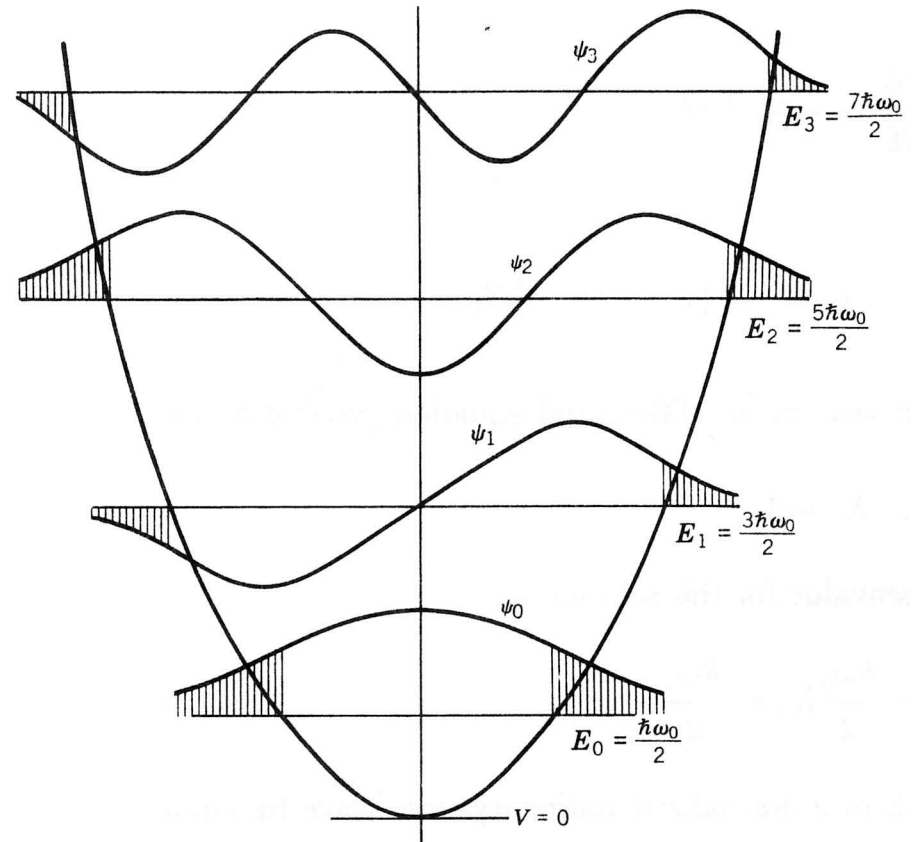
onde: 
$$u(x) = \left[ \frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}} \right] x$$

$$H_0[u(x)] = 1$$

$$H_1[u(x)] = 2u(x)$$

$$H_2[u(x)] = 4u(x)^2 - 2$$

$$H_3[u(x)] = 8u(x)^3 - 12u(x)$$



# Espectros de Vibração-Rotação

- Podemos tratar a vibração molecular como um oscilador harmônico:

$$E_n = (v + 1/2)h\nu_0$$

- onde  $v = 0, 1, 2, \dots$  e

$$\nu_0 = (1/2\pi)\sqrt{C/\mu}$$

