

Instituto de Física
USP

Física V – Aula 40

Professora: Mazé Bechara

Aula 40– O estado da arte no átomo de H. Os estados mistos no átomo de H.

- 1. Dúvidas dos estudantes .**
- 2. Aplicação: Os estados mistos do átomo de H.**
- 3. O estado da arte da mecânica quântica para o átomo de H – algumas palavras.**

Aplicação – estados mistos

Responda as questões tendo em vista as funções abaixo definidas: Ψ_1 , Ψ_2 , Ψ_3 , Ψ_4 e Ψ_5 . As funções $\Psi_{n,l,m_l}(r,\theta,\phi,t)$ representam as auto funções de energia na mecânica ondulatória de Schroedinger.

$$\psi_1(r,\theta,\phi,t) = \frac{1}{\sqrt{9}}\psi_{1,0,0}(r,\theta,\phi,t) + \sqrt{\frac{8}{9}}\psi_{2,1,1}(r,\theta,\phi,t)$$

$$\psi_2(r,\theta,\phi,t) = \frac{2}{3}\psi_{1,0,0}(r,\theta,\phi,t) + \frac{1}{3}\psi_{2,0,0}(r,\theta,\phi,t)$$

$$\psi_3(r,\theta,\phi,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{3,2,0}(r,\theta,\phi,t) + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{2,1,0}(r,\theta,\phi,t)$$

$$\psi_4(r,\theta,\phi,t) = \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_{2,2,1}(r,\theta,\phi,t) + \frac{1}{\sqrt{3}}\psi_{3,1,0}(r,\theta,\phi,t)$$

$$\psi_5(r,\theta,\phi,t) = \sqrt{\frac{4}{5}}\psi_{2,1,0}(r,\theta,\phi,t) + \frac{1}{\sqrt{5}}\psi_{2,1,-1}(r,\theta,\phi,t)$$

(a) Quais das funções dadas podem representar um estado do átomo de hidrogênio? Justifique.

(b) Mostre formalmente quais das funções dadas podem descrever estados que são auto-estados de energia. Mostre formalmente quais representam auto-estados de L^2 . Mostre formalmente quais são auto-estados de L_z . Justifique.

Aplicação: continuação

$$\psi_1(r, \theta, \phi, t) = \frac{1}{\sqrt{9}} \psi_{1,0,0}(r, \theta, \phi, t) + \sqrt{\frac{8}{9}} \psi_{2,1,1}(r, \theta, \phi, t)$$

$$\psi_2(r, \theta, \phi, t) = \frac{2}{3} \psi_{1,0,0}(r, \theta, \phi, t) + \frac{1}{3} \psi_{2,0,0}(r, \theta, \phi, t)$$

$$\psi_3(r, \theta, \phi, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{3,2,0}(r, \theta, \phi, t) + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{2,1,0}(r, \theta, \phi, t)$$

$$\psi_4(r, \theta, \phi, t) = \sqrt{\frac{2}{3}} \psi_{2,2,1}(r, \theta, \phi, t) + \frac{1}{\sqrt{3}} \psi_{3,1,0}(r, \theta, \phi, t)$$

$$\psi_5(r, \theta, \phi, t) = \sqrt{\frac{4}{5}} \psi_{2,1,0}(r, \theta, \phi, t) + \frac{1}{\sqrt{5}} \psi_{2,1,-1}(r, \theta, \phi, t)$$

- (c) Escolha uma das funções de onda que não seja auto-estado de energia. Determine formalmente o valor da energia média.
- (d) Determine o valor médio de L^2 e de módulo de L para um estado no qual tal grandeza não seja constante. Determine o valor médio de L_z para um dos estados que não têm L_z constante. Justifique o seu procedimento.
- (e) Qual a diferença mais importante na densidade de probabilidade dos estados mistos quando comparadas com as dos auto-estados de energia? O que tal resultado indica sobre transições entre estados atômicos? Justifique.

Comentários sobre o estado da arte da mecânica quântica para o H

1. A degenerescência em energia é quebrada quando admitida a existência do spin do elétron. Esta grandeza aparece na mecânica quântica relativística de Dirac que descreve a estrutura fina nas transições atômicas. E o resultado de Dirac é que a energia depende de um número quântico $j = \ell \pm s$ ($s = 1/2$) associado ao momento angular total J , que é a soma vetorial do momento angular L com o do spin S .
2. O curioso é que o resultado de Dirac, ainda que com outros números quânticos, coincide com o resultado da quantização de Wilson-Sommerfeld, com a correção relativística de Sommerfeld.

3. A energia do átomo de H na teoria de Dirac pode ser escrita na forma:

$$\alpha = -\frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)\hbar c} = \frac{1}{137} \quad E_{n,j} = -\frac{\mu e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

Comentários sobre o estado da arte da mecânica quântica para o H

2. O spin tem um momento magnético associado. Assim, **na quântica de Schroedinger**, tal grandeza pode ser colocada “a mão” e levada em conta a interação do momento magnético do spin com o associado ao momento angular orbital como um termo de energia potencial de interação, (além da interação coulombiana). Tal potencial, muito mais “fraco” do que o coulombiano, **é chamada de interação spin-órbita e é dada pela relação:**

$$\Delta U_{LS} = -f(\langle r \rangle) \vec{L} \cdot \vec{S} = -f(\langle r \rangle) \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)}{2}$$

Mas esta é uma outra (fascinante) história que fica para uma outra vez....

Transições entre auto-estados de energia na mecânica quântica

1. Os auto-estados de energia do H calculadas como descrito até aqui, potencial coulombiano atrativo carga carga, e mesmo com interação spin-orbita, não permitiriam transições. Tendo eles energia constante, $\Delta E=0$, e o princípio de incerteza exige $\Delta t \sim \tau \rightarrow \infty$. Assim, todos os estados estacionários seriam estáveis.
2. Como a natureza física, o que significa, os experimentos, revelam que há apenas um estado efetivamente estacionário nos elementos estáveis, o estado fundamental, pode-se concluir a partir deste contexto teórico, que os estados que não o fundamental, não podem ser estados “estritamente estacionários”. Os “estados mistos”, combinações lineares de auto-estados de energia, podem ajudar a descrever esta realidade.

Transições entre auto-estados de energia na mecânica quântica

3. Pode se pensar que o campo elétrico de interação não seja apenas o coulombiano carga-carga, mas haja também um termo de dipólo elétrico, como prevê o eletromagnetismo clássico. Neste caso, o momento de dipolo é: $\vec{p} = -e\vec{r}$, e para um estado misto, a transição dipolar só é não nulo quando $\Delta\ell = \pm 1$ e $\Delta m_\ell = 0$, ou ± 1 .
4. O tratamento quantitativo das transições na quântica de Schroedinger exige um pouco mais do que o feito nesta disciplina. Este tema será tratado em detalhes na disciplina mecânica quântica. Mas a chave está, em parte, nos estados mistos: combinações lineares de auto-estados de energia.