

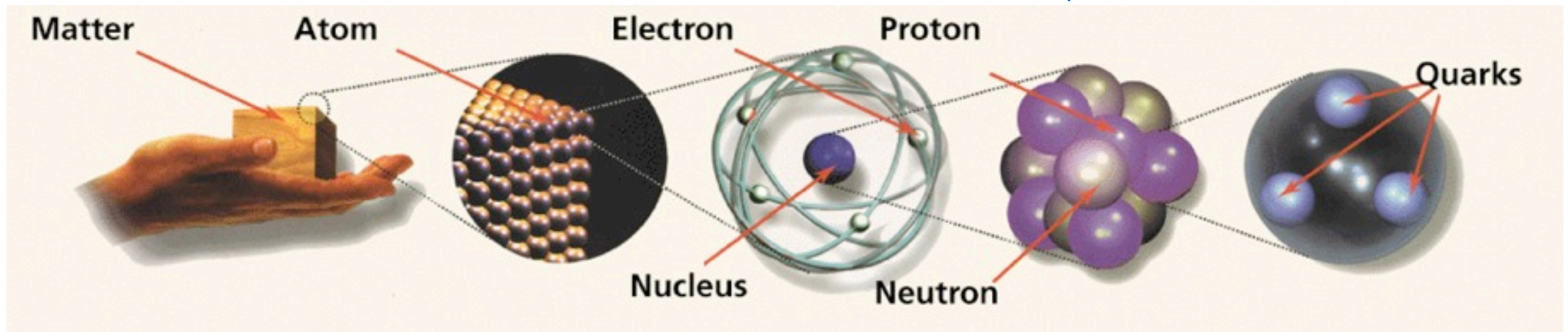
Física Moderna II

Aula 08

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

Física Moderna II

Particle Physics Education CD-ROM ©1999 CERN



Sólidos

Átomos de 1 e^-

Núcleo
Atômico

Partículas
Elementares

Átomos de 2 e^-

Átomos de muitos e^-

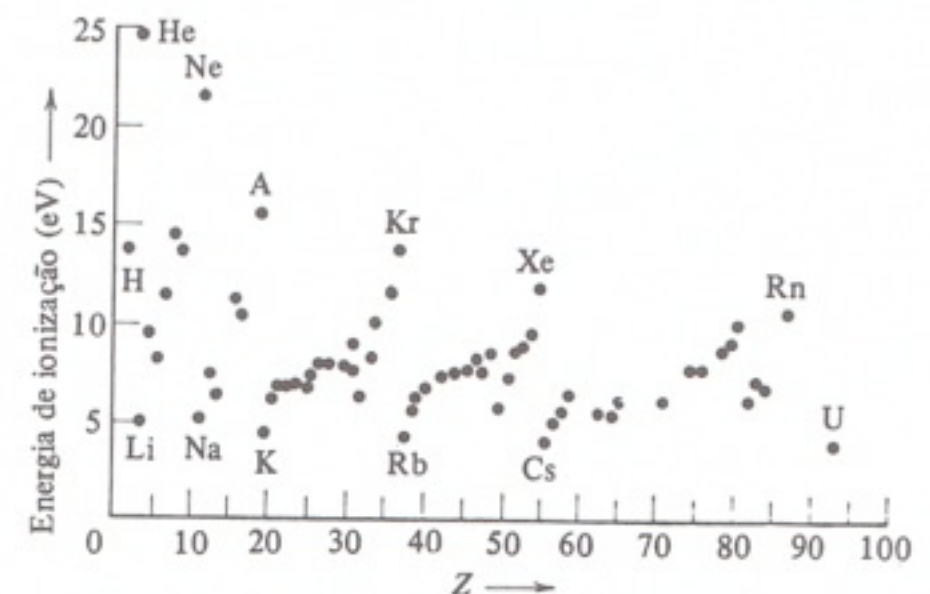
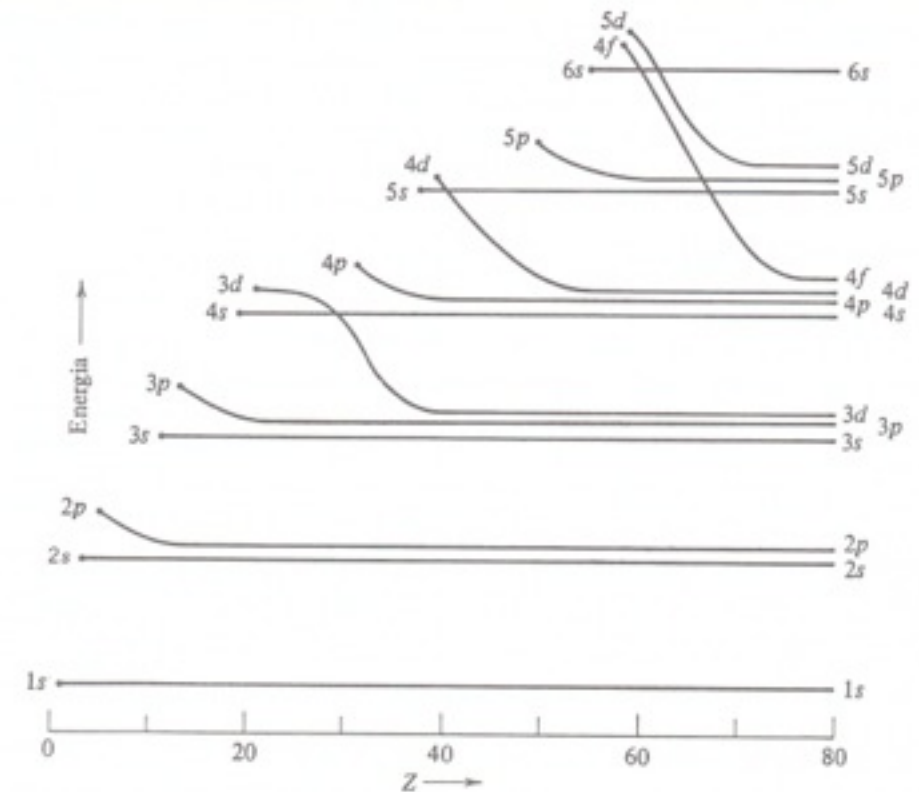
Moléculas

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

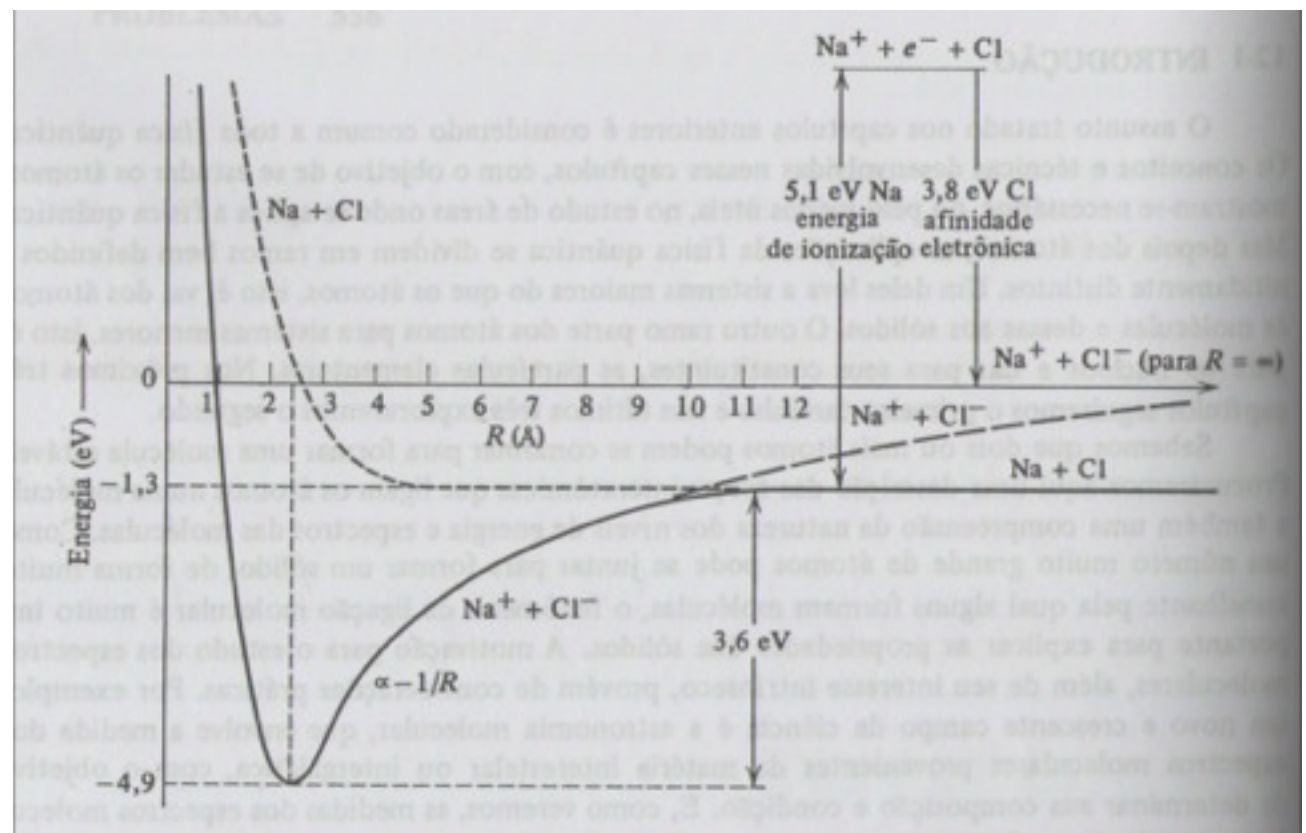
Ligação Iônica

- 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



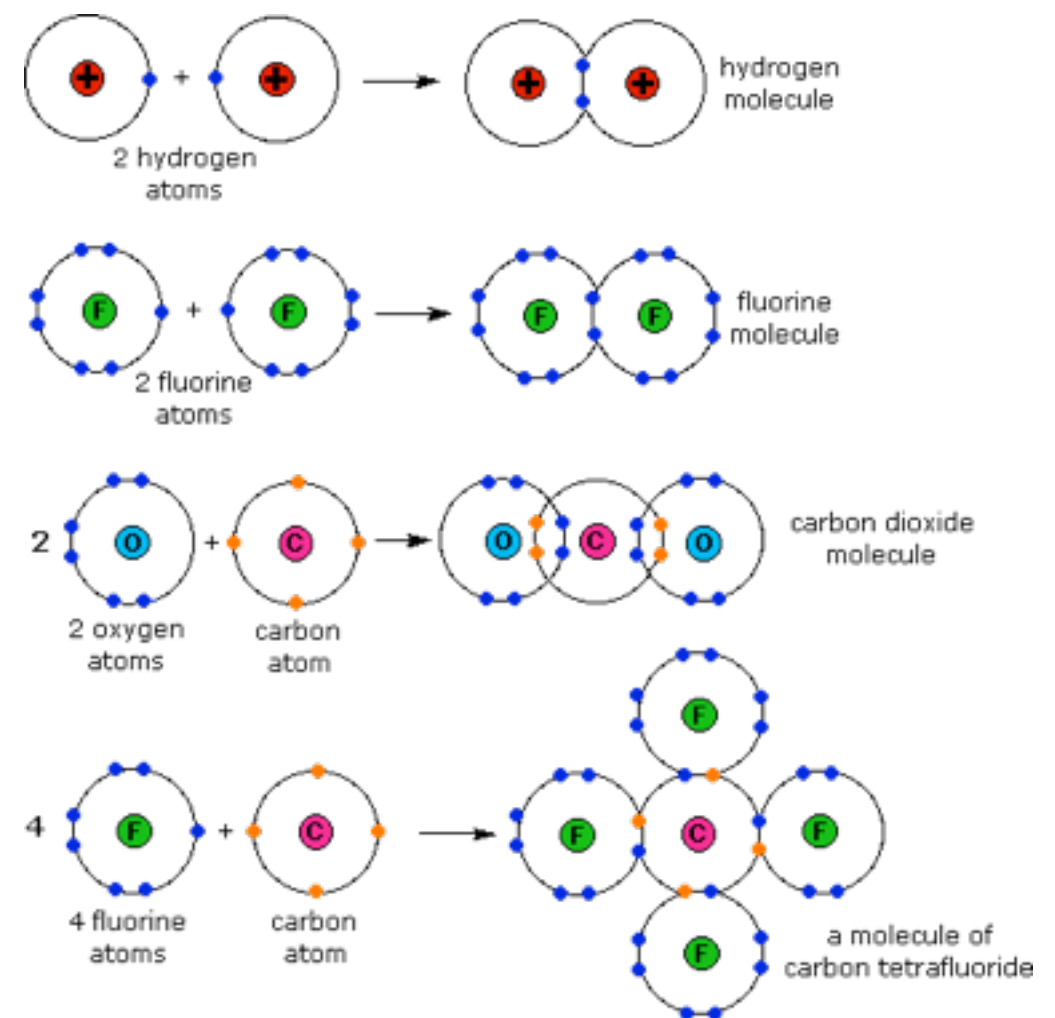
Ligação Iônica

- 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 $2.4 \text{ \AA}$



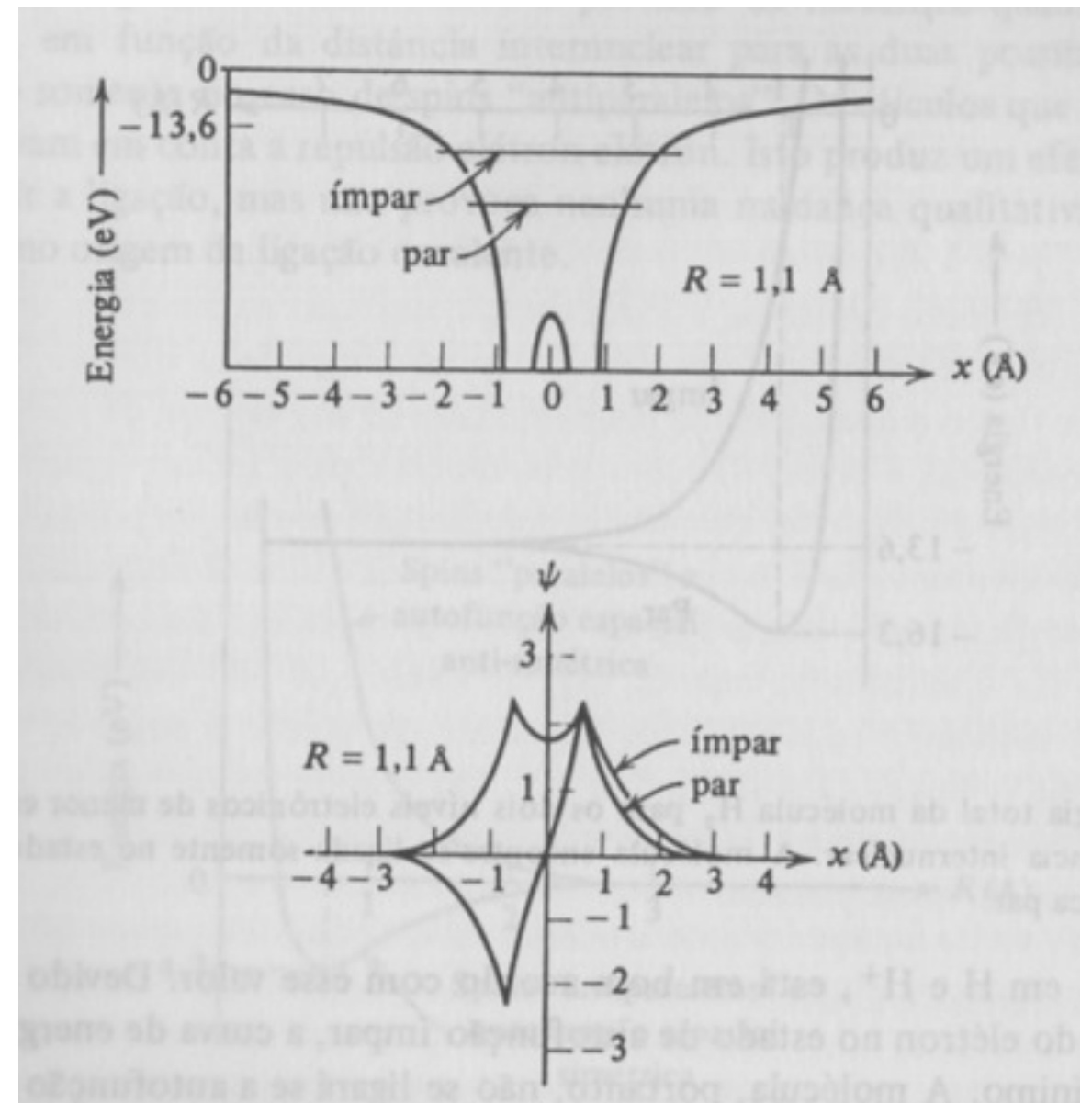
Ligação Covalente

- 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



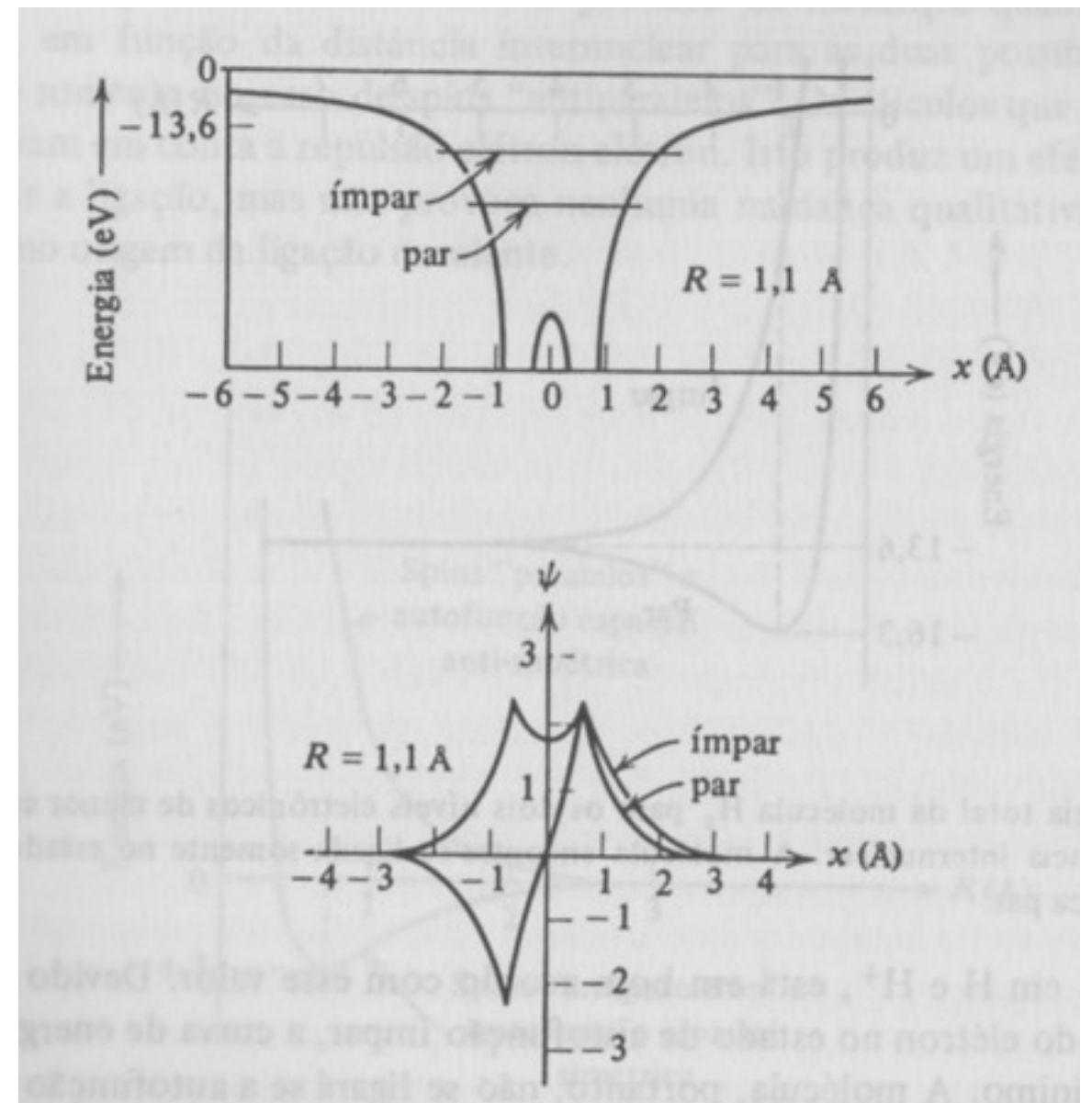
Ligação Covalente

- 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
- Se os elétrons estiverem entre os núcleos, a energia potencial do sistema será mínima, portanto poderá formar um estado ligado (molécula)



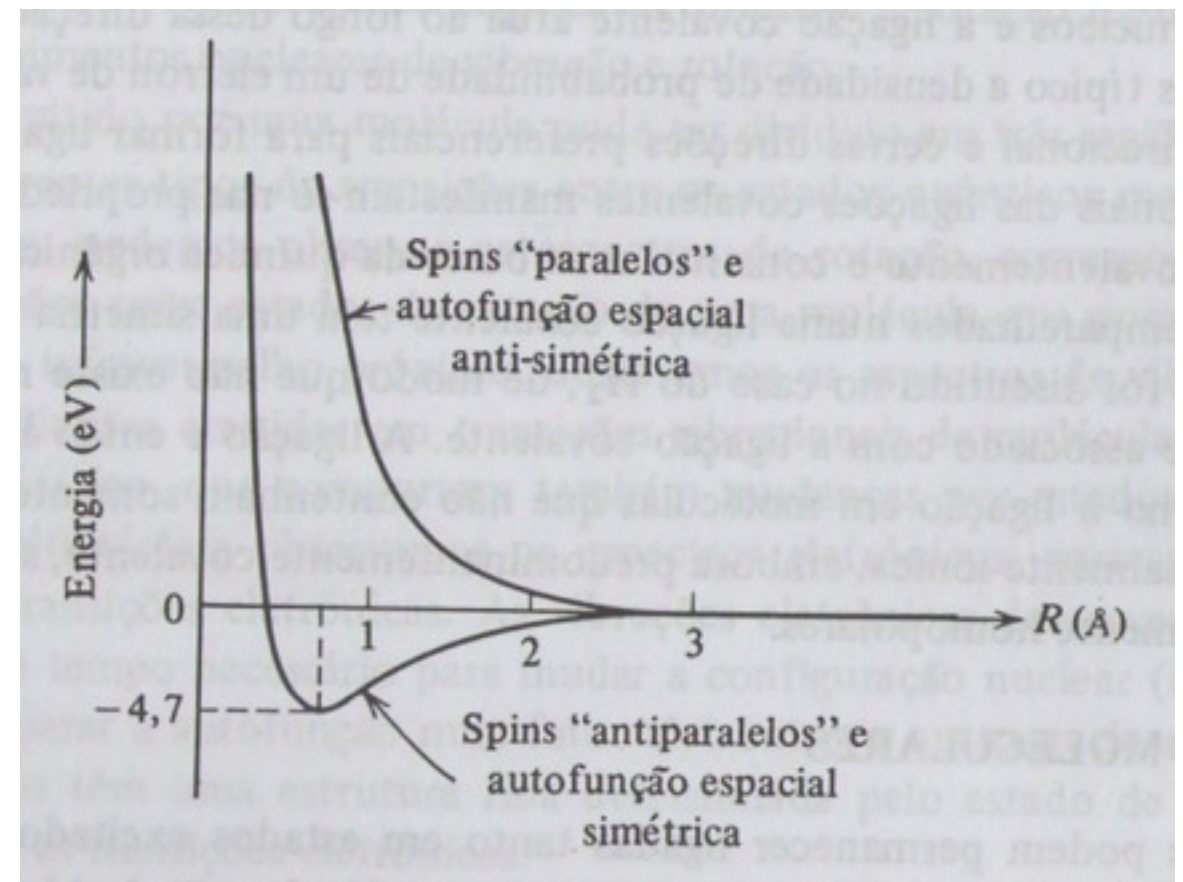
Ligação Covalente

- 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 do 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:

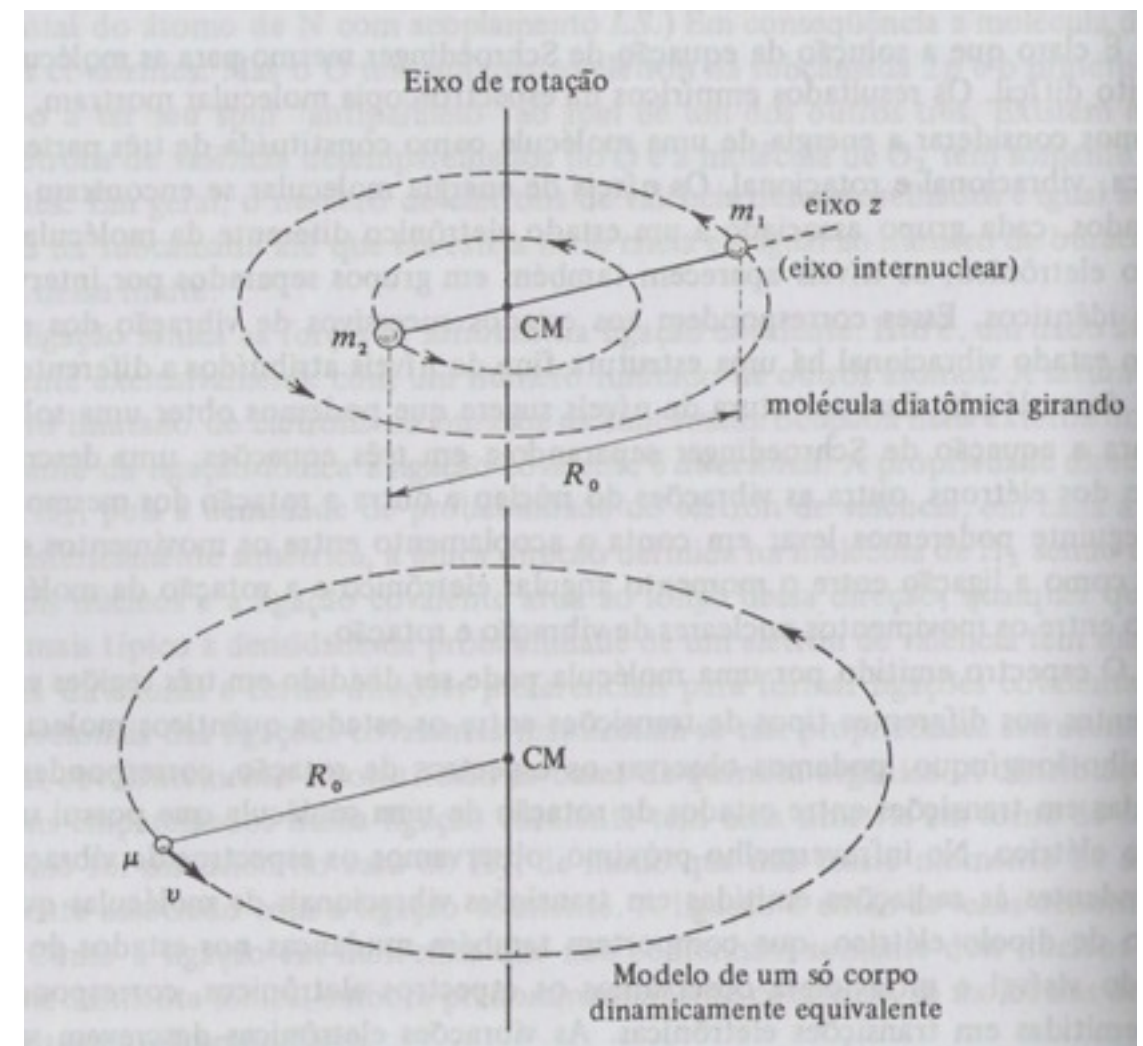
$$E_r = \frac{L^2}{2I}$$

- Quanticamente, tem-se que:

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

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

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



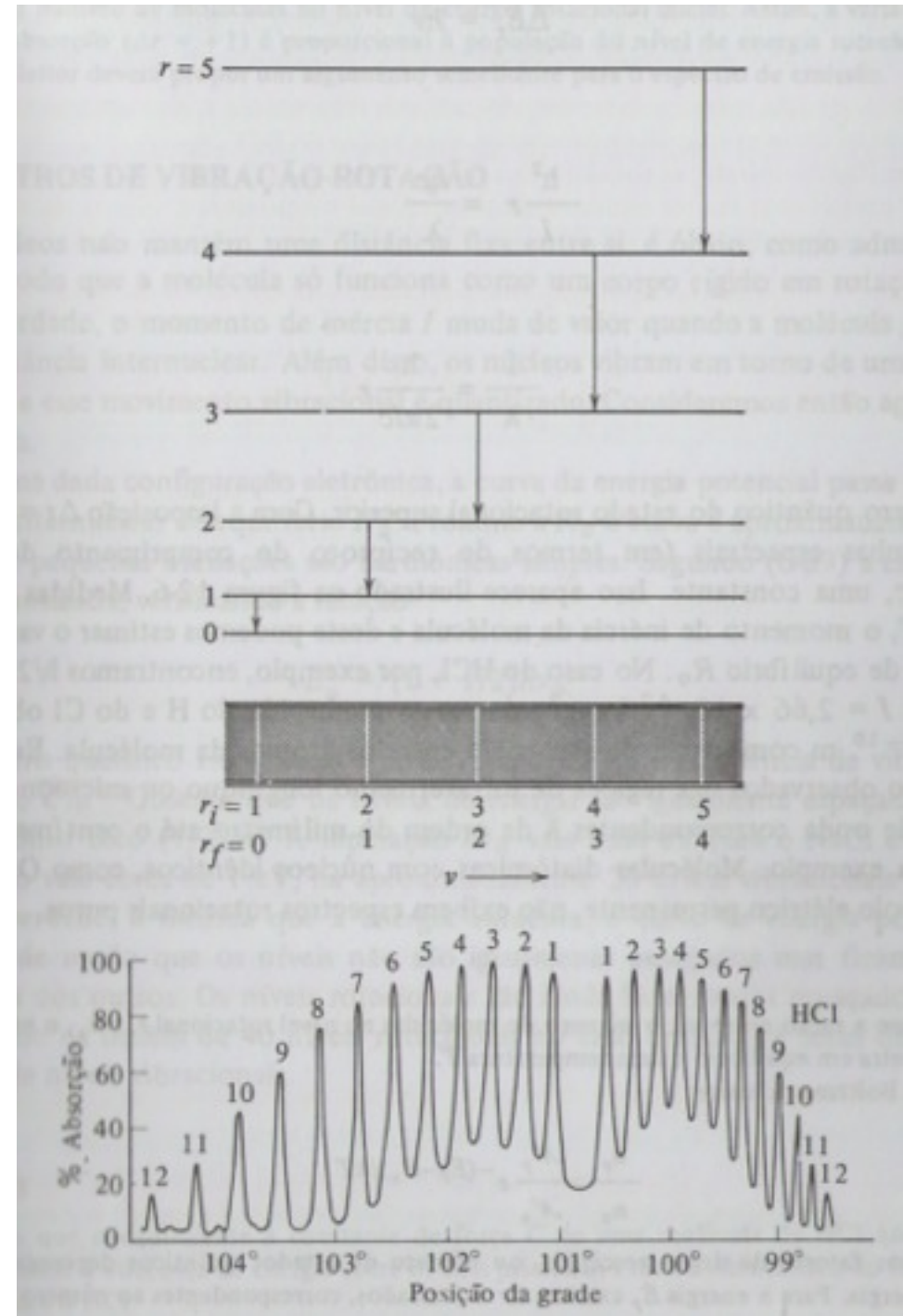
Espectros de Rotação

- 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:

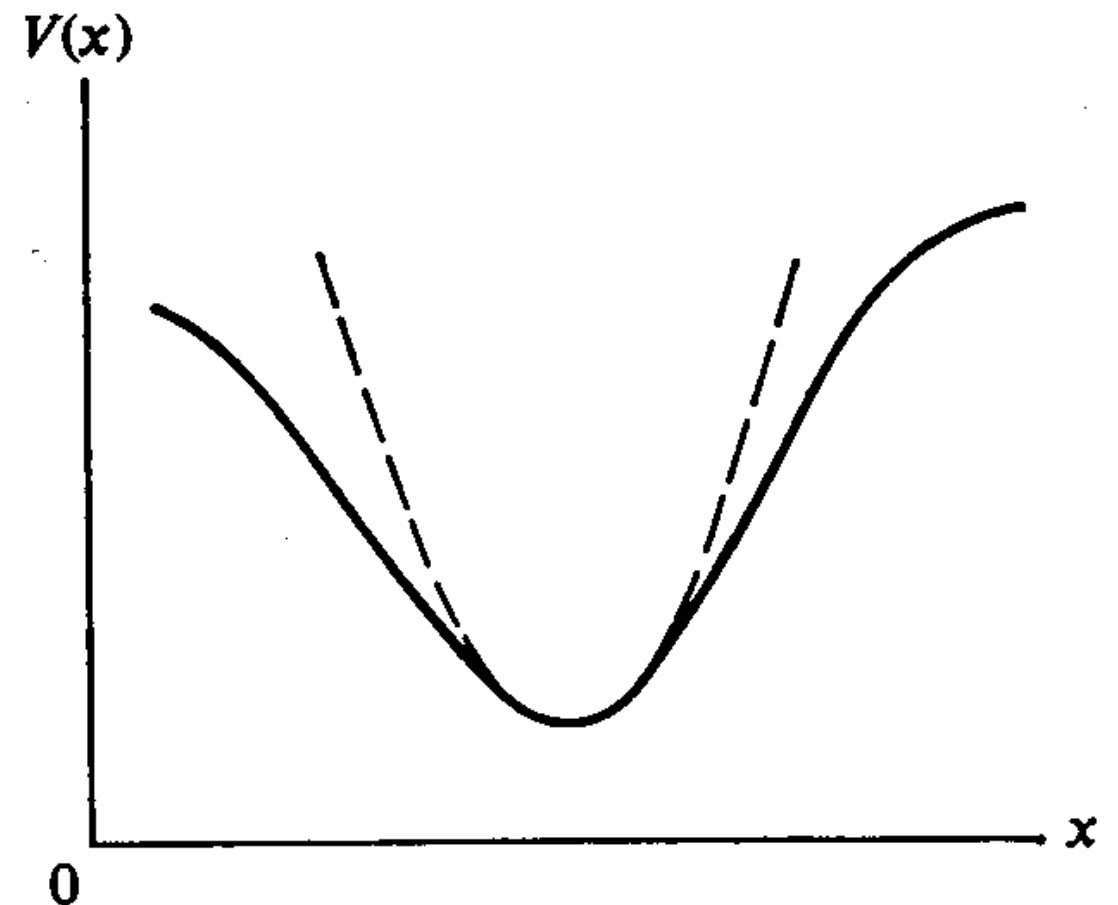
$$\Delta \left(\frac{1}{\lambda} \right) = \frac{\hbar}{2\pi I c}$$



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

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

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

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

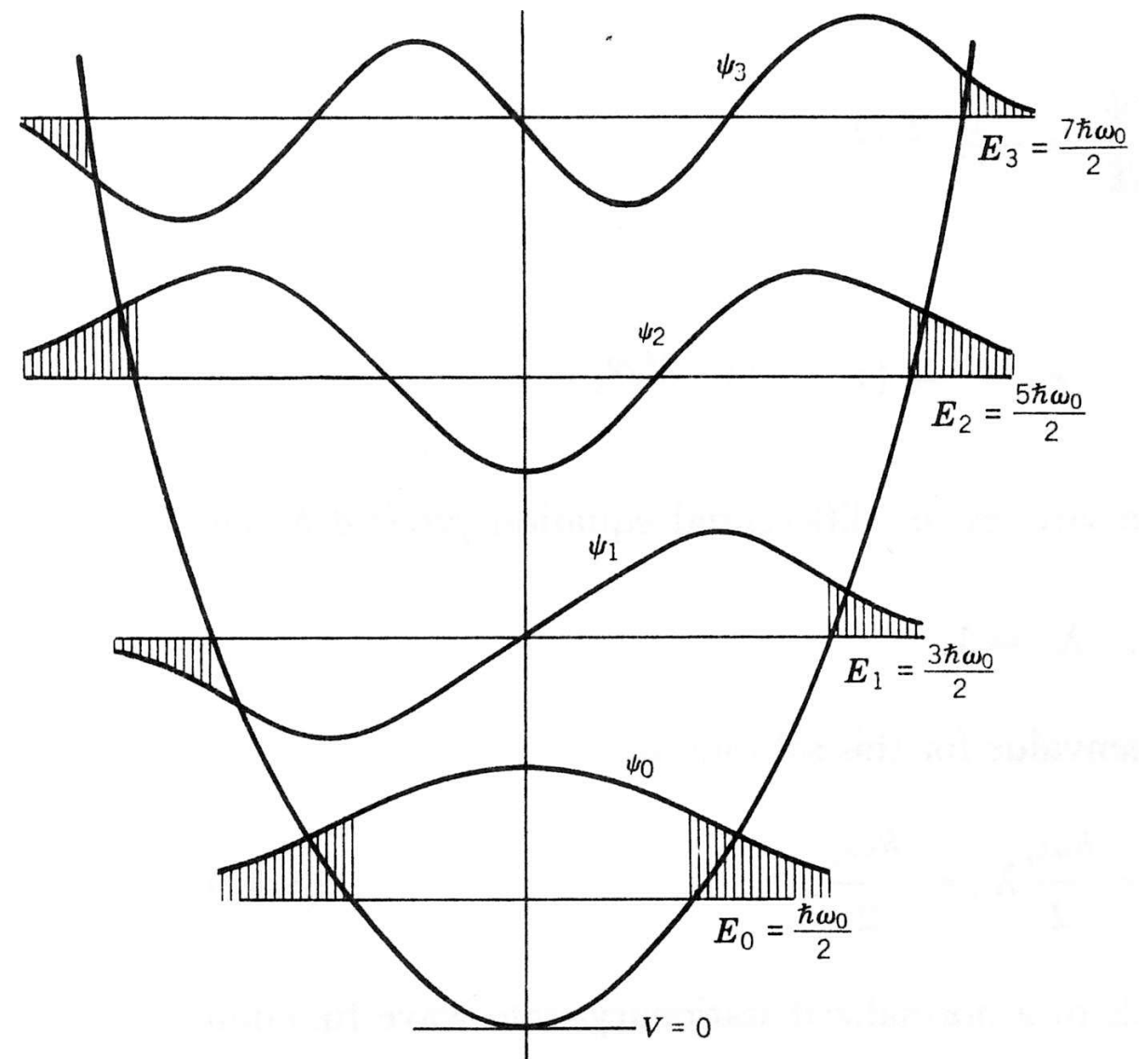
onde: $u(x) = \left[\frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}} \right] x$

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

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

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

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



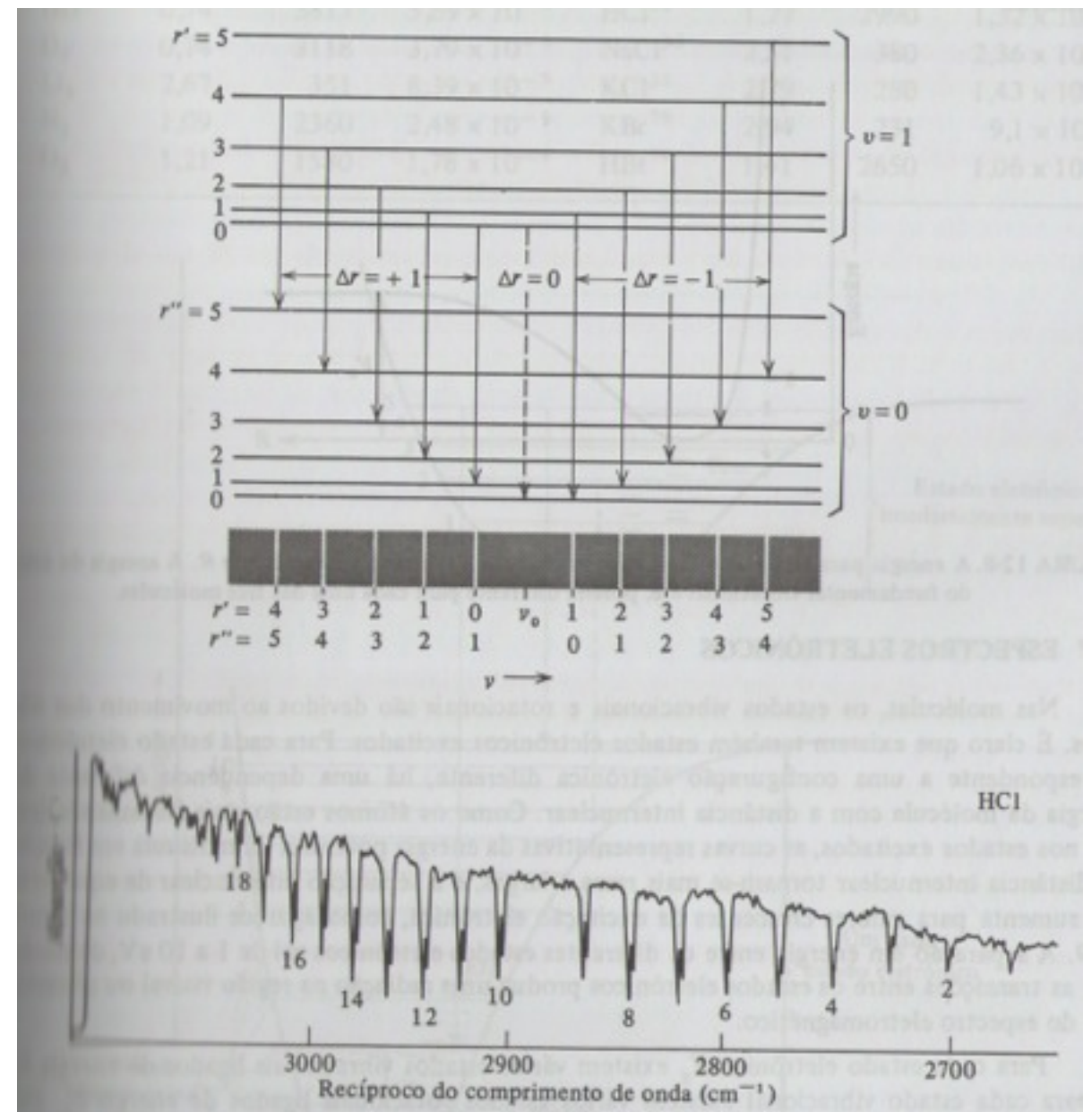
Espectros de Vibração-Rotação

- Podemos tratar a vibração molecular como um oscilador harmônico:

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

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

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



Espectros Eletrônicos

- Em moléculas, também existem diferentes estados devido a excitações dos elétrons (eletrônica)
- Elas são maiores que as vibracionais e rotacionais e mudam esses níveis de energia

- A energia total é dada por:

$$E = E_e + E_v + E_r$$

- e transições são dadas por:

$$\Delta E = \Delta E_e + (E'_v - E''_v) + (E'_r - E''_r)$$

