

Física Moderna II

Aula 04

Marcelo G Munhoz
Edifício HEPIC, sala 202, ramal 916940
munhoz@if.usp.br

Átomos de 2 elétrons

- Como tratar a partir da teoria de Schroedinger um átomo com dois elétrons ao invés de apenas um, como temos feito até o momento?
- Quais são as complicações que surgem para se tratar este sistema físico?

Átomos de 2 elétrons

- Vamos iniciar esse estudo tratando os elétrons de maneira independente, isto é, tratando apenas a interação de cada elétron com o núcleo e esquecendo a interação entre eles.
- Neste caso, a solução é idêntica àquela para o átomo de um elétron para cada elétron do átomo de He, porém com **dois** detalhes **muito importante** que não podemos ignorar

Partículas Idênticas

- É possível distinguir duas partículas do mesmo tipo (dois elétrons, dois prótons, etc.) do ponto de vista da mecânica quântica? Por quê?

Partículas Idênticas

- A consequência desse fato é que **observáveis** não podem depender de uma possível identificação das partículas
- Como podemos expressar isso formalmente na mecânica quântica?

Partículas Idênticas

- A única maneira de termos uma função de onda que representa observáveis que são **independentes** dessa troca de partículas é escrevendo funções de onda simétricas ou anti-simétricas

Princípio de Exclusão

- Em 1925, ao estudar os níveis de energia de átomos, Pauli propôs o princípio de exclusão (condição fraca):
- *Em um átomo multieletrônico nunca pode haver mais de um elétron ocupando o mesmo estado quântico*

Princípio de Exclusão

- De uma maneira mais geral (condição forte), tem-se que:
 - *Um sistema constituído de vários elétrons deve ser descrito por uma autofunção total anti-simétrica*
- Esse enunciado pode ser melhor compreendido notando que:

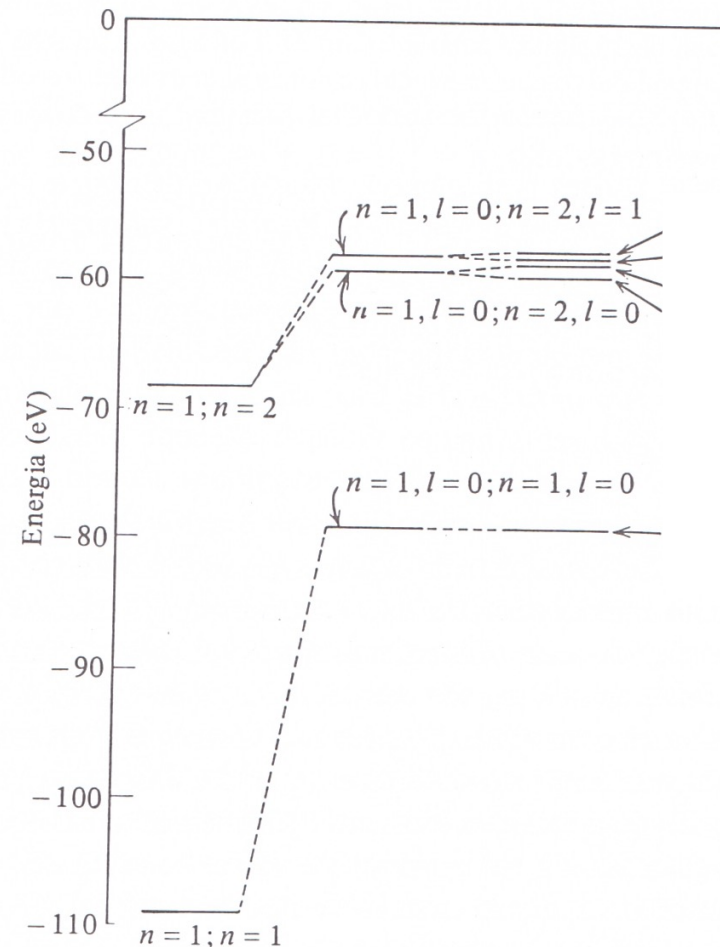
$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(1) \cdot \psi_\alpha(2) - \psi_\alpha(1) \cdot \psi_\alpha(2)] = 0$$

Princípio de Exclusão

- Isso só vale para o elétron?
- Para outras partículas além do elétron, é necessário determinar experimentalmente se o princípio de exclusão se aplica, ou seja, se a função de onda de um sistemas com várias dessas partículas deve ser simétrica ou anti-simétrica
- Observou-se que partículas de *spin* semi-inteiro, chamadas de férmions, se aplica esse princípio. Já para partículas com *spin* inteiro, chamadas de bósons, ele não se aplica (vamos discutir isso mais tarde)

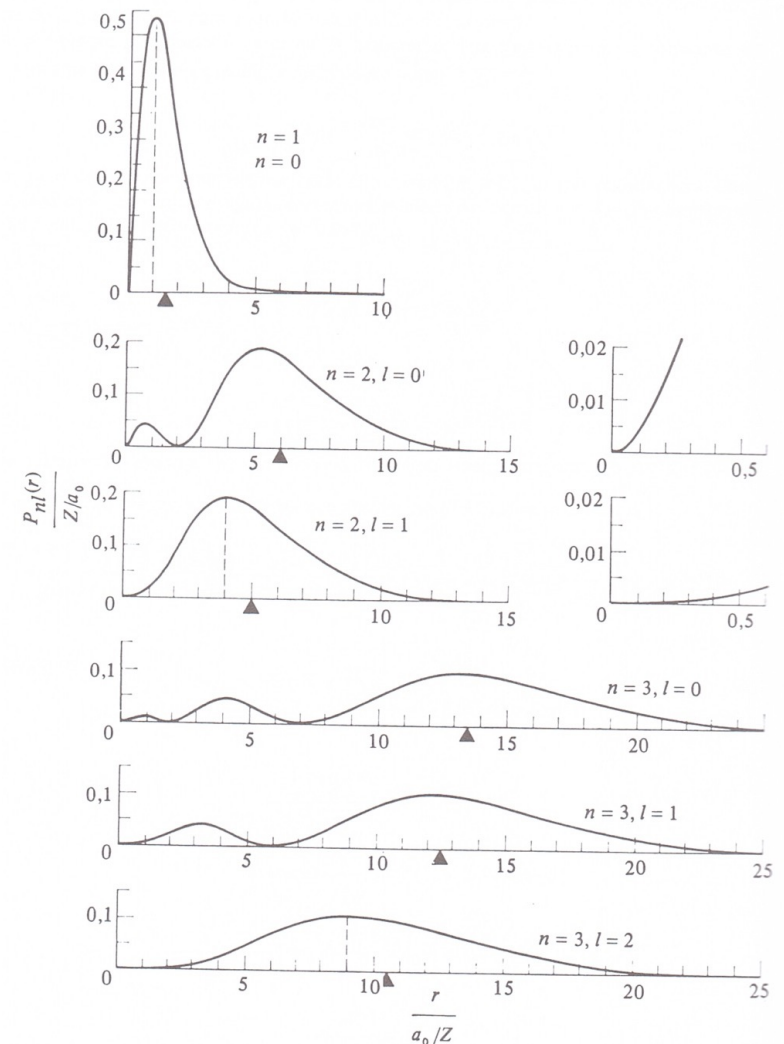
Átomos de 2 elétrons

- Quão bem funciona essa abordagem (elétrons independentes)?
- Não muito bem...
- Vemos que a previsão para os níveis de energia são bem diferentes daqueles medidos
- Inicialmente, notamos que os níveis de energia dependem do número quântico l . Por quê?



Átomos de 2 elétrons

- Isso é devido a interação Coulombiana entre os elétrons!
- Se um elétron está no nível $n=1$, $l=0$ e o outro está em $n=2$ e $l=1$, eles tendem a estar mais próximos do que se o segundo elétron estivesse em $n=2$ e $l=0$.
- Portanto a repulsão Coulombiana é maior e a energia potencial menor



○ Átomo de He

- Das discussões anteriores, vimos que a função de onda que descreve os dois elétrons de um átomo de He deve ser anti-simétrica, uma vez que elétrons são férmions
- Isso tem consequências muito interessantes que não tem analogia na física clássica

A Função de Onda do Átomo de He

- Inicialmente, vamos separar as funções de onda em uma parte espacial e outra relativa ao *spin*:

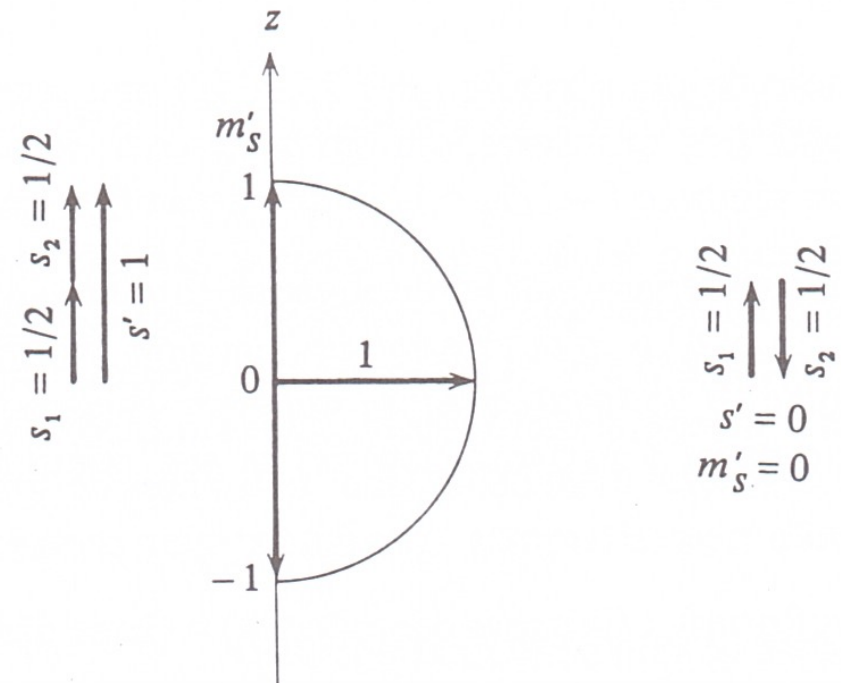
$$\psi_T(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2) = \psi_{a,b}(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2) \cdot \psi_{S_1, S_2}(m_{S_1}, m_{S_2})$$

- Portanto, para a função de onda total ser anti-simétrica, ou a parte espacial ou a parte de *spin* deve ser anti-simétrica

A Função de Onda do Átomo de He

- As funções de onda possíveis para a parte de *spin* - a simétrica ou tripleto e a anti-simétrica ou singleto - podem ser interpretadas a partir do *spin* total atribuído às duas partículas

$$\vec{S}' = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$$

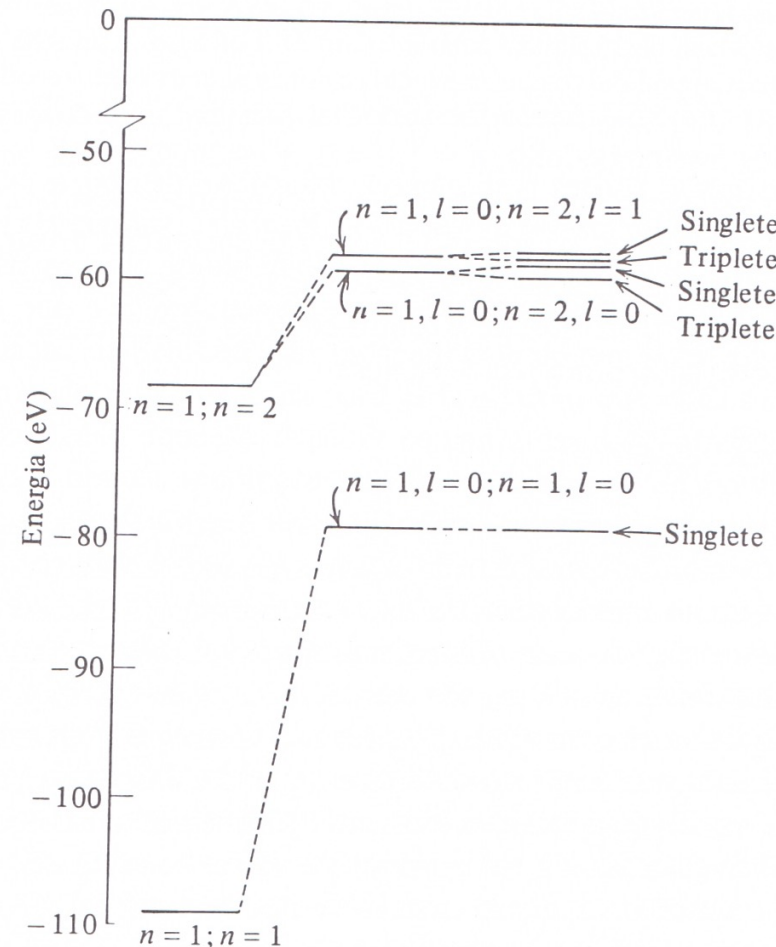


“Forças de Troca”

- O que acontecerá se dois elétrons se aproximarem em cada um dos casos descritos pelas diferentes funções de onda possíveis?
 - No caso em que a parte espacial é anti-simétrica e portanto a parte de *spin* é um tripleto (simétrica), a função de onda se anulará quando os elétrons se aproximarem
 - No caso inverso, a função de onda terá uma intensidade maior
 - Isso faz surgir uma espécie de “força” que procura manter elétrons de *spins* de mesmo sentido afastados e elétrons com *spins* de sentidos opostos próximos

Níveis de energia do Átomo de He

- O efeito da chamada “força de troca” em manter elétrons próximos ou afastados é a mudança nos níveis de energia, visto que quanto mais próximos os elétrons maior será a energia potencial devido à repulsão Coulombiana



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!!