Física IV – Poli – Engenharia Elétrica: *17ª Aula* (21/10/2014)

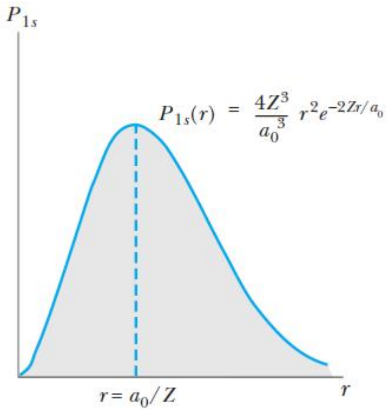
Prof. Alvaro Vannucci

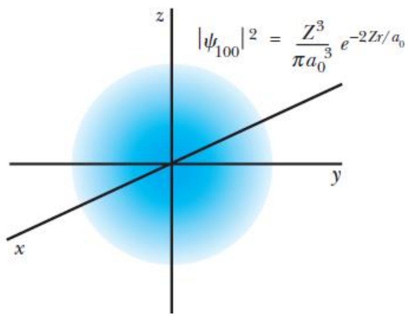
Na última aula vimos:

- Número quântico de *spin* (elétron): $\begin{cases} \boxed{m_s = +1/2} \\ \boxed{m_s = -1/2} \end{cases}$

- No átomo de hidrogênio, a probabilidade de se encontrar o elétron em uma casca esférica de raio *r* e espessura *dr* será:

$$P(r)dr = |\psi|^2 \, dV = |\psi|^2 \, 4\pi r^2 dr \quad \Rightarrow \quad \boxed{P(r) = 4\pi r^2 |\psi|^2}$$





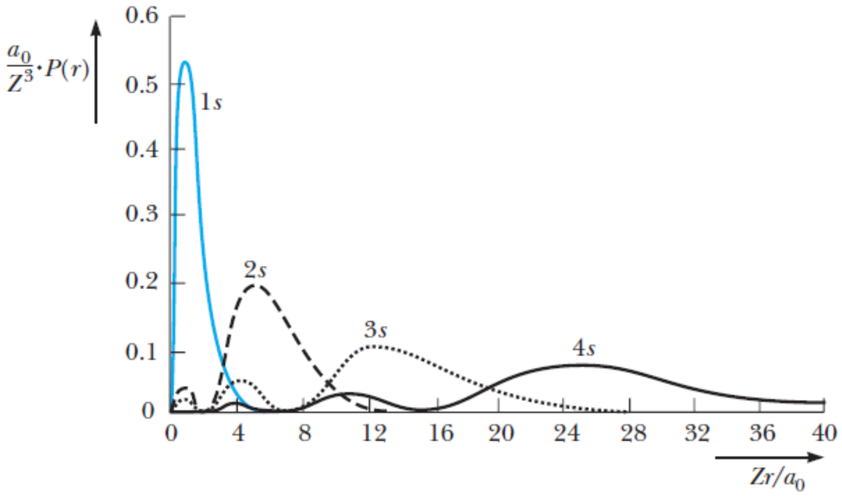
- No estado fundamental (nível *1s*) tem-se: $P_{1s}(r) = \left(\frac{4r^2}{a_0^3}\right) e^{-2r/a_0}$

- Percebemos, então, que não tem muito sentido em falar sobre o "*tamanho*" do átomo: a posição do elétron em relação ao núcleo é dada pela "*nuvem de probabilidades*" correspondente ao estado em que ele se encontra.

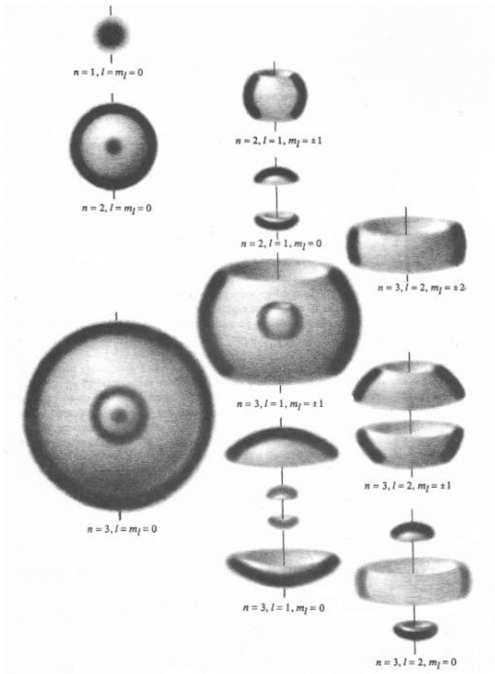
➢ Agora, quando o átomo de hidrogênio no estado fundamental é excitado para um nível de energia acima ($n = 2 \Rightarrow E_2 = \frac{-13{,}6}{2^2} = -3{,}4eV$, por exemplo), se ele estiver no sub-nível correspondente a $\underline{\underline{l = 0}}$ (estado *2s*), a função de onda correspondente novamente só irá depender da coordenada radial *r*, e a distribuição de probabilidades será esférica.

$$\underline{\psi_{2s} = \psi_{2s}(r) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}}$$

➢ Na figura abaixo, esta e outras distribuições esféricas de probabilidades (de se encontrar o elétron mais próximo ou mais afastado do núcleo) são mostradas (todas correspondentes a valores de $l = 0$).



➢ Porém quando $l \neq 0$ então também haverá uma dependência das funções de onda ψ_{nlm_l} com as *coordenadas angulares* θ e ϕ, resultando um *caráter direcional* das "*nuvens de probabilidade*", que serão as responsáveis pelas ligações químicas (veja a figura ao lado).



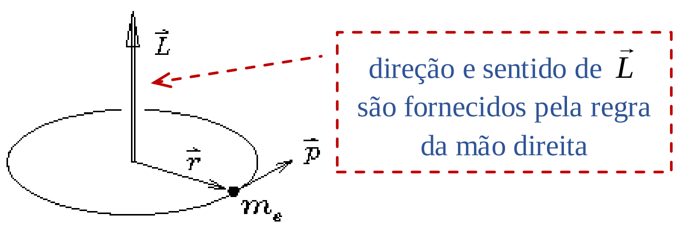
➢ Por exemplo, para $n = 2$ as autofunções $\left(\psi_{nlm_l}\right)$ correspondentes (para átomos hidrogenóides) são:

$$\begin{cases} \psi_{200} = \dfrac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \dfrac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \\ \psi_{210} = \dfrac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \dfrac{Zr}{a_0}\, e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \cos\theta \\ \psi_{21\pm1} = \dfrac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \dfrac{Zr}{a_0}\, e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \sin\theta\, e^{\pm i\phi} \end{cases}$$

➢ Vamos agora discutir quais seriam as grandes físicas relacionadas com os números quânticos.

➢ O *número quântico orbital* (*azimutal*) $\boldsymbol{l}$, por exemplo, está intrinsicamente relacionado com o Momento Angular do elétron em relação ao núcleo atômico $\left(|\vec{L}| = |\vec{r} \times \vec{p}| = mvr\right)$.

➢ Visualização clássica:



- Quando a equação de Schrödinger é resolvida adequadamente, obtém-se então que $\boxed{\left|\vec{L}\right| = L = \sqrt{l(l+1)}\hbar}$; e não $n\hbar$ como Bohr havia proposto no seu modelo semi-clássico.

- De forma que o átomo de hidrogênio, quando ele encontra-se no estado $\underline{\underline{p\ (l=1)}}$, por exemplo, o seu Momento Angular Orbital L será:

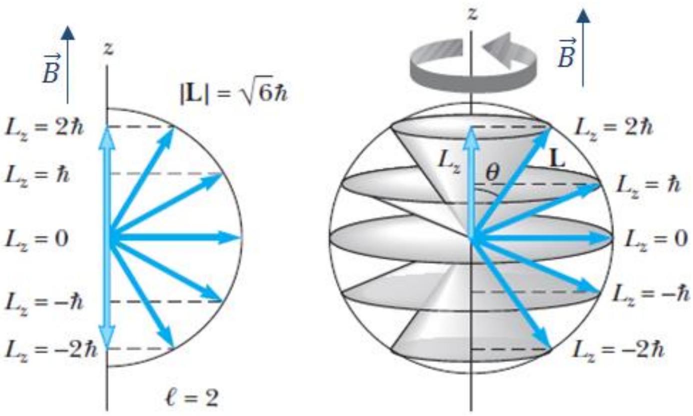
$$\underline{\underline{L = \sqrt{2}\hbar = 1{,}5\times10^{-34}\, J\cdot s}}$$

- Com relação ao *número quântico magnético* (m_l), ele indica de que forma o momento angular L encontra-se alinhado em relação a uma dada direção no espaço (eixo z, no referencial do laboratório). Tem-se, consequentemente, o *Momento de Dipolo Magnético* $\left(\vec{\mu} = I\vec{A}\right)$ correspondente (associado à "*espira de corrente*" eletrônica).

- Ou seja, se um campo magnético (de fraca intensidade), for aplicado (e definindo desta forma, "por convenção", o eixo z do laboratório), então m_l fornecerá a ***projeção de*** $\vec{L}$ nesta direção:

$$\boxed{L_z = m_l\,\hbar}$$

- Na figura abaixo, é possível visualizar os possíveis valores de L_z, relacionados com os valores de $m_l = -l,\ldots,0,\ldots,+1$ (como já vimos antes), para $l = 2$:



como vemos, para $l = 2$:

m_l	L_z
-2	-2 ħ
-1	-ħ
0	0
1	ħ
2	2ħ

- Note da figura anterior que o momento angular orbital $\vec{L}$ <u>nunca se alinha</u> (paralela ou antiparalelamente) com o $\vec{B}_{ext}$ (eixo z), de forma que L_z será <u>sempre menor</u> que $|\vec{L}|$

- Veja também que o ângulo θ encontra-se igualmente quantizado, sendo dado por:

$$\boxed{\cos\theta = \frac{L_z}{|\vec{L}|} = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}}$$

- É importante observar que o fato de L_z ser menor que $|\vec{L}|$ deve-se ao *princípio de incerteza* que impõe a não possibilidade do elétron movimentar-se em um plano bem definido.

- Isto porque, caso o movimento estivesse exatamente em um plano (*xy*, por exemplo, de forma que $\Delta z = 0$), então $\vec{L}$ estaria consequentemente na direção z e $\Delta p_z = 0$, tal que $\Delta z \Delta p_z = 0$ ($p_z = mv_z$), violando o princípio da incerteza: $\Delta z \Delta p_z \geq 0$.

- Ou seja, o vetor momento angular $\vec{L}$ <u>não pode</u> apontar em uma direção bem definida, mas sim descreve um cone no espaço ($\vec{L}$ como que precessa em torno do eixo z – veja figura anterior)

- De maneira que somente <u>o módulo</u> de $\vec{L}$ <u>e a sua componente</u> L_z é que podem ter seus valores conhecidos: as outras componentes (L_x e L_y) não podem ser especificadas.

- Interessante notar ainda que os *valores médios* de L_x e L_y são nulos (pois $\vec{L}$ muda continuamente), enquanto que $\underline{\langle L_z \rangle = m_l \hbar}$.

- **Exemplo:** Considere um átomo de hidrogênio em um estado $l = 3$. Calcule $|\vec{L}|$ correspondente e os valores permitidos de L_z e θ (em graus).

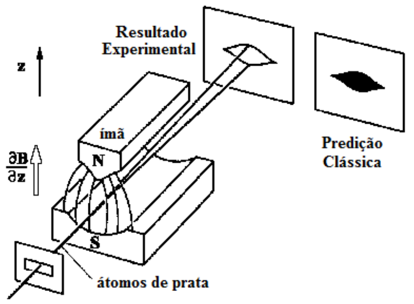
Resolução: Como vimos:

$$\begin{cases} |\vec{L}| = L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \Rightarrow \underline{L = 2\sqrt{3}\hbar} \\ \text{Valores de } L_z = m_l\hbar;\ m_l = -l, -l+1, \ldots, 0, \ldots l-1, l \\ \qquad \therefore L_z = -3\hbar, -2\hbar, -\hbar, 0, \hbar, 2\hbar, 3\hbar \\ \cos\theta = \dfrac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}} = \pm 0{,}866;\ \pm 0{,}577;\ \pm 0{,}289;\ 0 \end{cases}$$

$$\theta = 30°;\ 54{,}8°;\ 73{,}2°;\ 90°;\ 107°;\ 125°;\ 150°$$

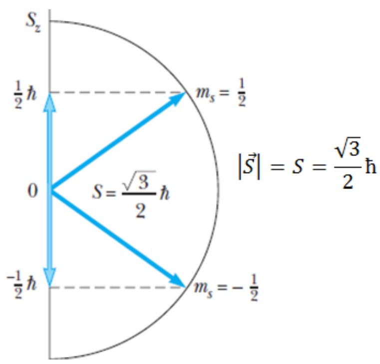
Spin do elétron

- Como vimos, a existência do *spin* eletrônico (que não resulta da equação de Schrödinger) foi proposta na tentativa de explicar o dubleto do sódio e os resultados obtidos na experiência de Stern-Gerlach (disparando átomos neutros de prata ($l=0$) através de um campo magnético não-uniforme).
- Pela Mecânica Clássica, o momento de dipolo magnético atômico (orbital) na direção do eixo z (μ_z) pode assumir qualquer valor; e como $\vec{\tau}=\vec{\mu}\times\vec{B}$ então deveria se esperar impactos no anteparo formando uma mancha (distribuição) contínua.
- Pela Mecânica Quântica, uma distribuição contínua só deveria acontecer para átomos com $l=0$ (que era o caso dos átomos neutros de prata).



- Experimentalmente, porém, duas franjas bem definidas foram observadas no anteparo! Daí a necessidade de se adotar o número quântico de spin $m_s=\pm 1/2$ (<u>para cima</u> / <u>para baixo</u>).
- Quem estabeleceu a relação deste número quântico com a grandeza física *Momento Angular Quantizado de Spin* $\vec{S}$ foi *Paul Dirac*, em 1929.
- Em analogia com o momento angular orbital, tem-se que: $\boxed{\left|\vec{S}\right|=S=\sqrt{s(s+1)}\hbar}$;

  sendo que <u>$s=1/2$</u>, sempre!



- Assim, a <u>componente</u> (projeção) do vetor momento angular de spin <u>na direção do eixo</u> z (referencial do laboratório) poderá assumir apenas dois valores: $+1/2\hbar$ e $-1/2\hbar$.

  $\therefore\ \boxed{S_z=m_s\hbar=\pm\frac{1}{2}\hbar}$

  analogamente a $L_z=m_l\hbar$

- Pode ser demonstrado que *o momento de dipolo magnético de spin* do elétron ($\vec{\mu}_s$) está relacionado com o *momento angular de spin* ($\vec{S}$) pela equação: $\boxed{\vec{\mu}_s=-\frac{e}{m}\vec{S}}$
- Como a componente $S_z=\pm\hbar/2$, então a componente μ_s do momento de dipolo magnético de spin poderá ter os valores:

$$\boxed{\mu_{sz}=\pm\frac{e\hbar}{2m}}=\pm 9,27\times 10^{-24}\ J/T\equiv \mathit{Magneton\,de\,Bohr}\ (\mu_B)$$

- ***Exercício 18 – Capítulo 29:***

a) Encontre a densidade de massa de um próton imaginando-o como uma esfera maciça de $r = 10^{-15} m$.

b) Considere um modelo clássico para o elétron considerando-o uma esfera maciça com a mesma densidade de massa do próton e encontre o seu raio.

c) Imagine que este elétron possui momento angular de spin $S = I\omega = \hbar / 2$, devido à rotação clássica em torno do seu eixo z e determine a velocidade de um ponto situado no equador do elétron, comparando-a com a velocidade da luz. Dado: $m_p = 1{,}67\times10^{-27} kg$, $m_e = 9{,}1\times10^{-31} kg$ e $I_{esfera} = \frac{2}{5}mr^2$.

Resolução:

a) $$\rho_p = \frac{m_p}{V_p} = \frac{1{,}67\times10^{-27}}{(4/3\pi)(10^{-15})^3} \Rightarrow \underline{\rho_p = 4\times10^{17} kg/\mathrm{m}^2}$$

b) $$\rho_e = \rho_p = \frac{m_e}{(4/3\pi)r_e^3} \Rightarrow r_e^3 = \frac{9{,}1\times10^{-31}}{(4/3\pi)(4\times10^{17})} \Rightarrow \underline{r_e = 8{,}4\times10^{-17} m}$$

c) $$I_{esfera} = \frac{2}{5}mr^2 \Rightarrow I_e = \left(\frac{2}{5}\right)(9{,}1\times10^{-31})(8{,}4\times10^{-17})^2 = \underline{2{,}5\times10^{-63} kg\cdot m^2}$$

$$S = I\omega = \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \omega_e = \frac{\hbar}{2I_e} = \frac{v_e}{r_e} \Rightarrow v_e = \frac{(8{,}4\times10^{-17})(6{,}6\times10^{-34})}{(4\pi)(2{,}5\times10^{-63})} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \underline{v_{equador} = 1{,}8\times10^{12} m/s}$$

6.000 vezes maior que a velocidade da luz!!