

Física IV

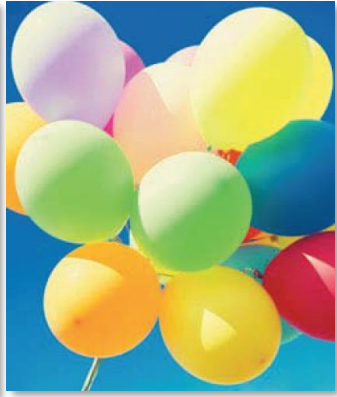
2020

Professor: Valdir Guimarães

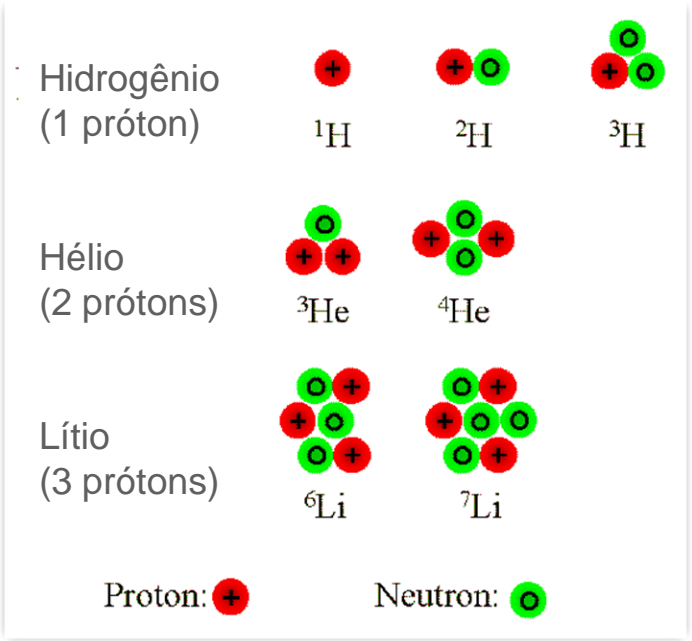
E-mail: valdir.guimaraes@usp.br

Aula-20: Atomo de hidrogênio

- ❑ O que faz o lítio e o hélio serem tão diferentes?
- ❑ O lítio é um metal que inflama espontaneamente em contato com a água.
- ❑ O hélio é um gás (inerte) que dificilmente participa de uma reação química.
- ❑ O elétron adicional faz o lítio se comportar de modo muito diferente do hélio, principalmente porque:



- (i) o terceiro elétron é fortemente repelido pelas forças elétricas dos outros dois elétrons;
- (ii) o terceiro elétron e o núcleo maior tornam o átomo do lítio mais pesado que o átomo do hélio;
- (iii) existe um limite no número de elétrons que podem ocupar um determinado estado quântico;
- (iv) o núcleo do lítio possui mais cargas positivas que o núcleo do hélio.



O que vamos aprender

- ❑ 41.1 Como estender os cálculos da mecânica quântica para problemas tridimensionais.
- ❑ 41.2 Como resolver a equação de Schrödinger para uma partícula capturada em uma caixa cúbica.
- ❑ 41.3 Como descrever os estados de um átomo de hidrogênio em termos de números quânticos.
- ❑ 41.4 Efeito Zeeman: de que forma os campos magnéticos afetam o movimento orbital dos elétrons.
- ❑ 41.5 Como sabemos que os elétrons são dotados de momento angular intrínseco.
- ❑ 41.6 A maneira de analisar a estrutura de átomos com muitos elétrons.

$n = 1$: camada K

$n = 2$: camada L

$n = 3$: camada M

$n = 4$: camada N

$l = 0$: estados s

$l = 1$: estados p

$l = 2$: estados d

$l = 3$: estados f

$l = 4$: estados g

$l = 5$: estados h

$n \geq \ell + 1$, ou seja, $\ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$

$m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell$

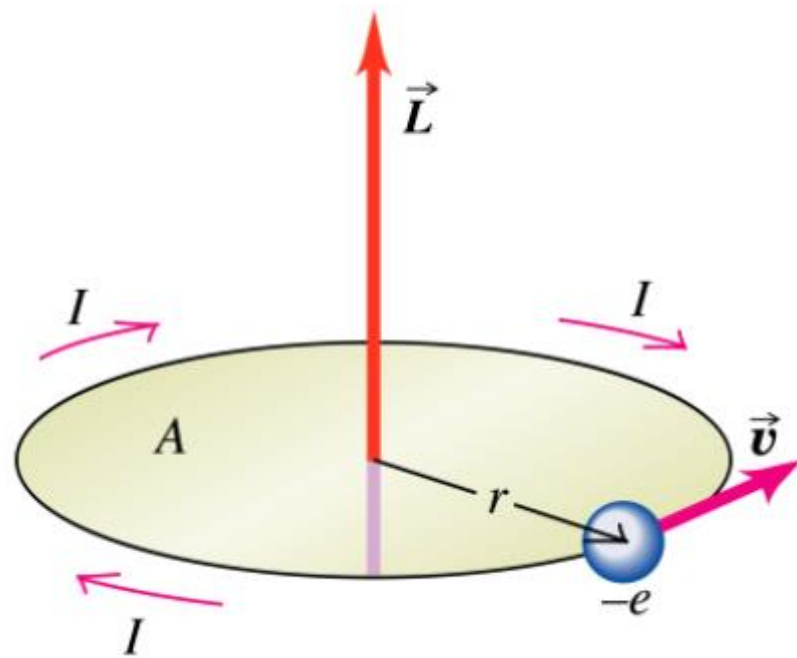
TABELA 41.1 Estados quânticos do átomo de hidrogênio.

n	l	m_l	Notação espectroscópica	Camada
1	0	0	1s	K
2	0	0	2s	L
2	1	-1, 0, 1	2p	
3	0	0	3s	
3	1	-1, 0, 1	3p	M
3	2	-2, -1, 0, 1, 2	3d	
4	0	0	4s	N

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

No modelo de Bohr,
deveríamos ter:

$$L = n\hbar$$

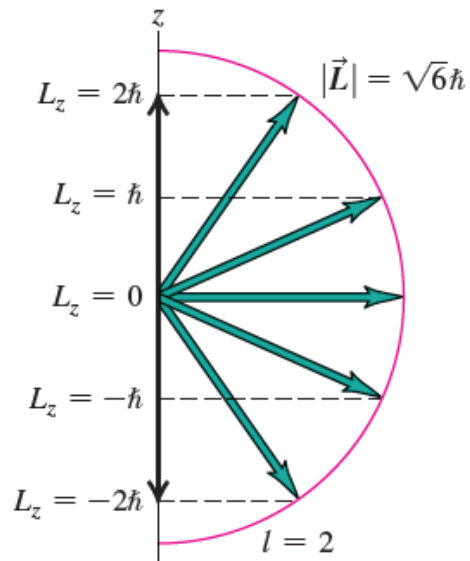


m_l é o número quântico magnético
 l é o número quântico orbital

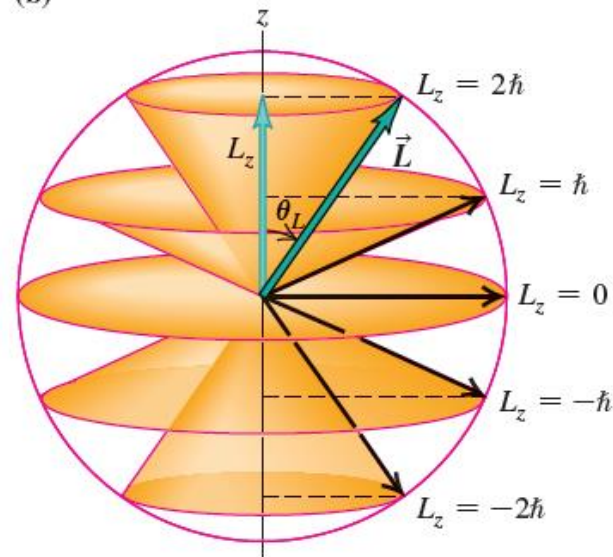
$$L_z = m_l \hbar \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l)$$

Como esses números só podem assumir valores inteiros, essas grandezas são quantizadas

(a)



(b)



$$\langle l^2 \rangle = \hbar^2 l(l+1)$$

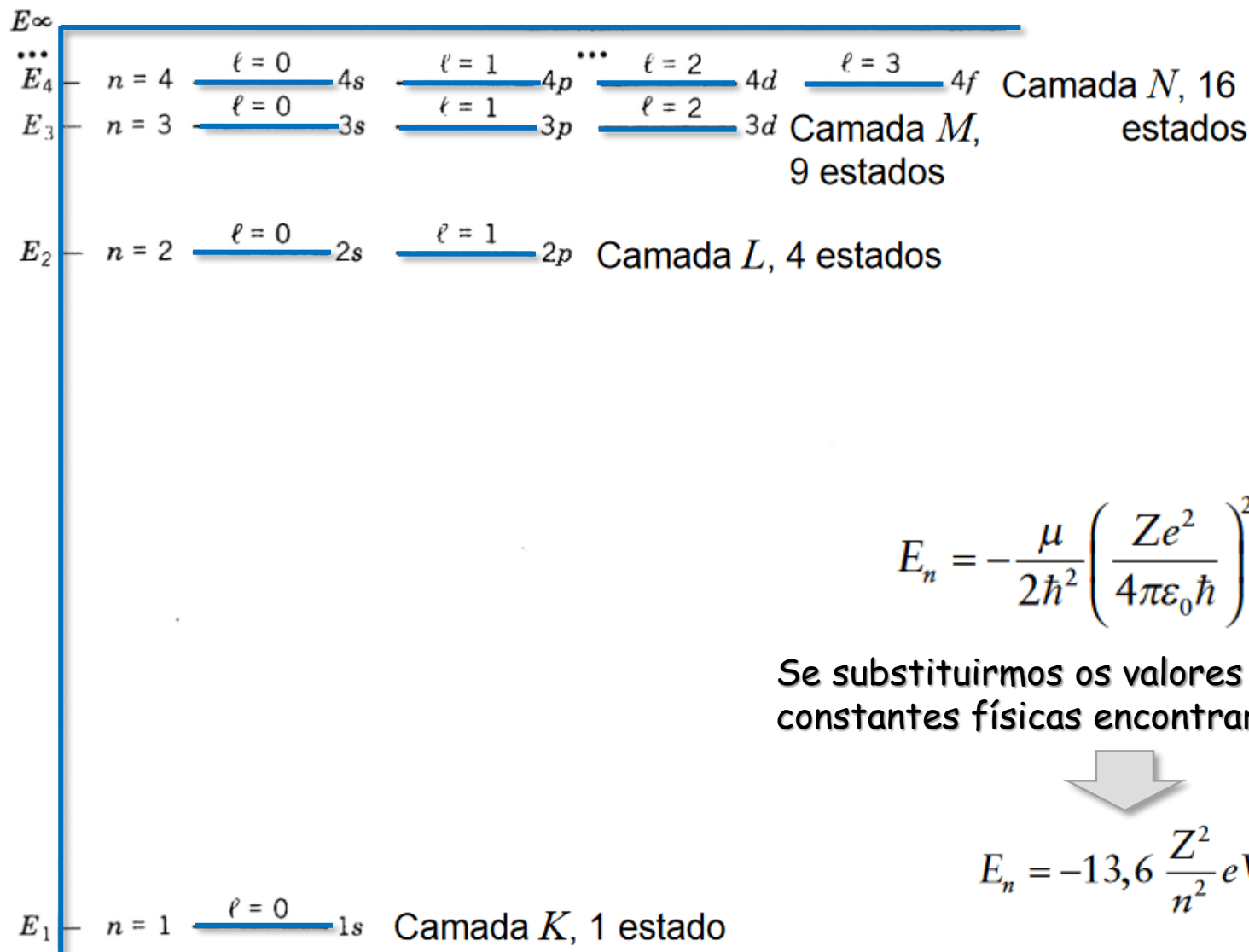
Valor esperado para o momento angular ao quadrado

Quando $l = 2$,

$$L = \sqrt{2(2+1)} \hbar = \sqrt{6} \hbar = 2,45 \hbar$$

$$L_z = 2 \hbar$$

Veja que o a unidade do momento angular é \hbar



$$E_n = -\frac{\mu}{2\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \right)^2 \frac{1}{n^2}$$

Se substituirmos os valores das constantes físicas encontraremos que:



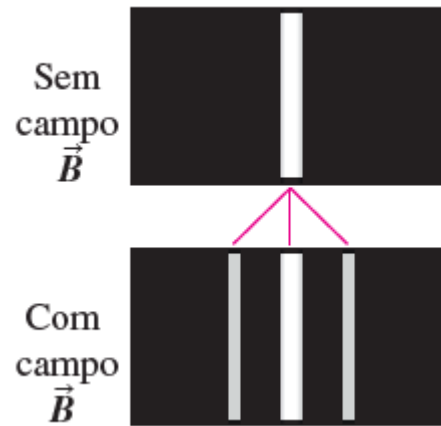
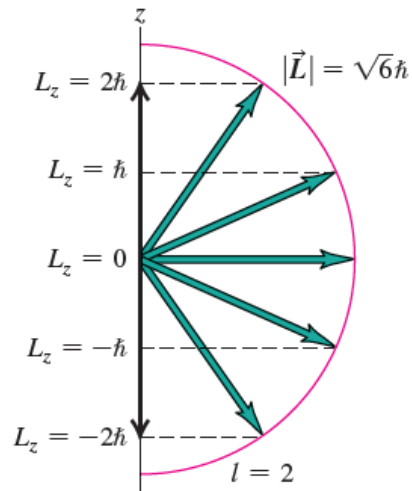
$$E_n = -13,6 \frac{Z^2}{n^2} eV$$

**Energia depende apenas de "n".
Portanto, temos uma degenerescência (mesma energia) para os diferentes valores de l e m para um mesmo n)**

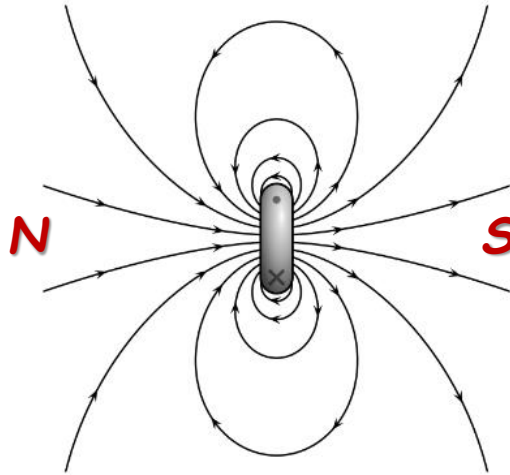
O EFEITO ZEEMAN

O efeito Zeeman é o desdobramento dos níveis de energia e das correspondentes linhas espectrais quando os átomos são colocados na presença de um campo magnético. Esse efeito confirma experimentalmente a quantização do momento angular.

(a)



dipolo magnetico.



Wikipedia, the free encyclopedia

momento de dipolo magnetico ou momento magnetico,

Uma espira plana de área conduzindo uma corrente I possui um momento magnético.

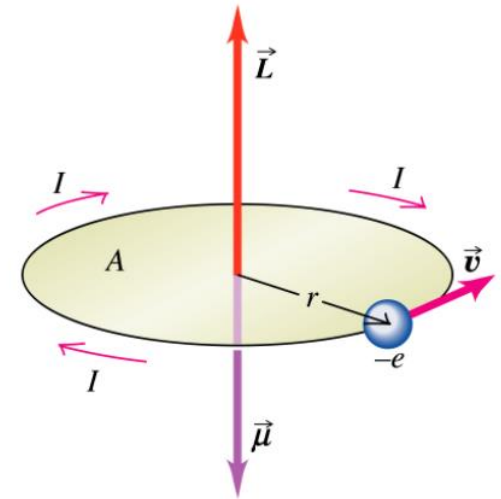
$$\vec{\mu} = I\vec{A}$$



Um elétron em órbita gera uma corrente que, por sua vez, produz um campo magnético similar ao de um dipolo magnético

$$I = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi r}$$

$$\mu = I \cdot A = \frac{ev}{2\pi r} \cdot \pi r^2 = \frac{evr}{2}$$



Copyright © Addison Wesley Longman, Inc.

Podemos agora associar esse momento de dipolo magnético com o momento angular do elétron, que é dado por:

$$L = mvr$$



$$\mu = \frac{e}{2m} L$$

$$\mu = \frac{e}{2m} L$$

A razão entre o módulo do momento de dipolo magnético e o momento angular é chamado de razão giromagnética.

$$\mu/L = e/2m$$

Além disso, no modelo de Bohr $L = n\hbar$ então a unidade do momento de dipolo também deve ser \hbar .

O menor momento de dipolo deve ser então: $\mu_b = \frac{e\hbar}{2m}$

Essa grandeza é chamada de magneton de Bohr

$$\mu_b = 5,788 \times 10^{-5} \text{ eV/T} = 9,274 \times 10^{-24} \text{ J/T ou A} \cdot \text{m}^2$$

O momento de dipolo magnético é então dado por:

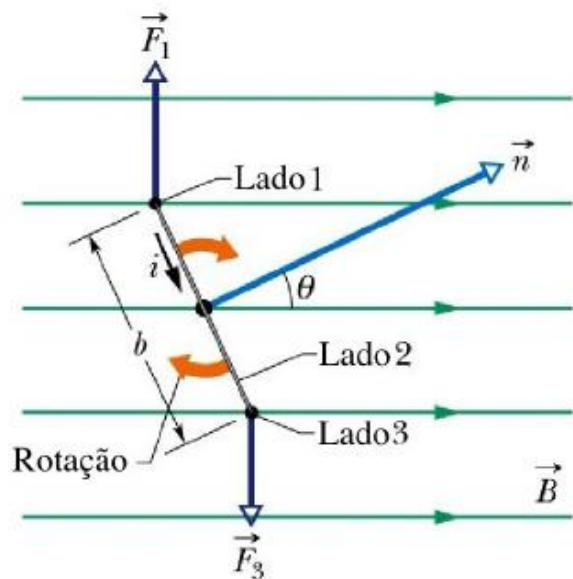
$$\vec{\mu} = -\frac{g_l \mu_b}{\hbar} \vec{L}$$

μ_b magneton de Bohr

$g_l = 1$ fator giromagnético do elétron

Quando um momento de dipolo magnético é colocado na presença de um campo magnético, o campo exerce um torque sobre o dipolo.

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$



Esse torque é no sentido de alinhar o momento de dipolo com o campo magnético

A energia potencial U associada com essa interação é dada por:

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Suponha que o campo magnético seja direcionado ao longo do eixo z .

A energia U associada com a interação entre o momento magnético do átomo e o campo magnético externo é

$$U = -\mu_z B$$

$$\mu_z = -\frac{e}{2m} L_z$$



$$L_z = m_l \hbar,$$

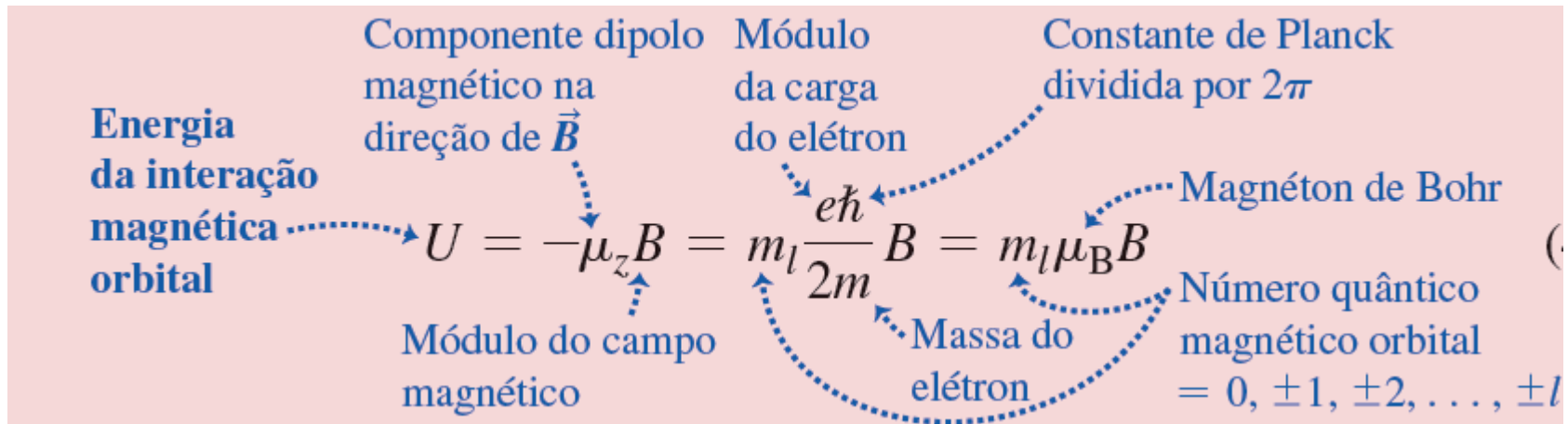
$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$



$$\mu_z = -\frac{e}{2m} L_z = -m_l \frac{e\hbar}{2m}$$

$$\mu_z = -\frac{e}{2m}L_z = -m_l \frac{e\hbar}{2m}$$

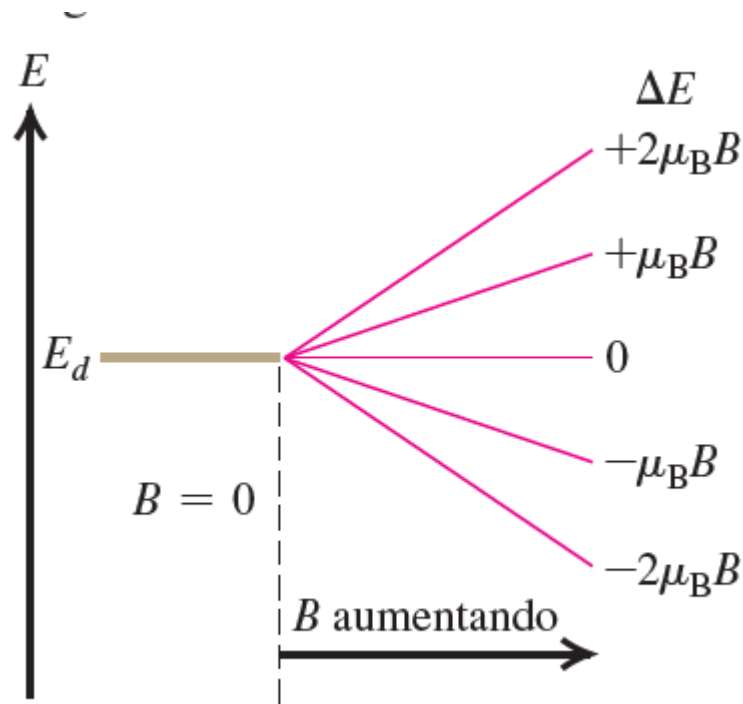
Em termos do magneton de Bohr $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$

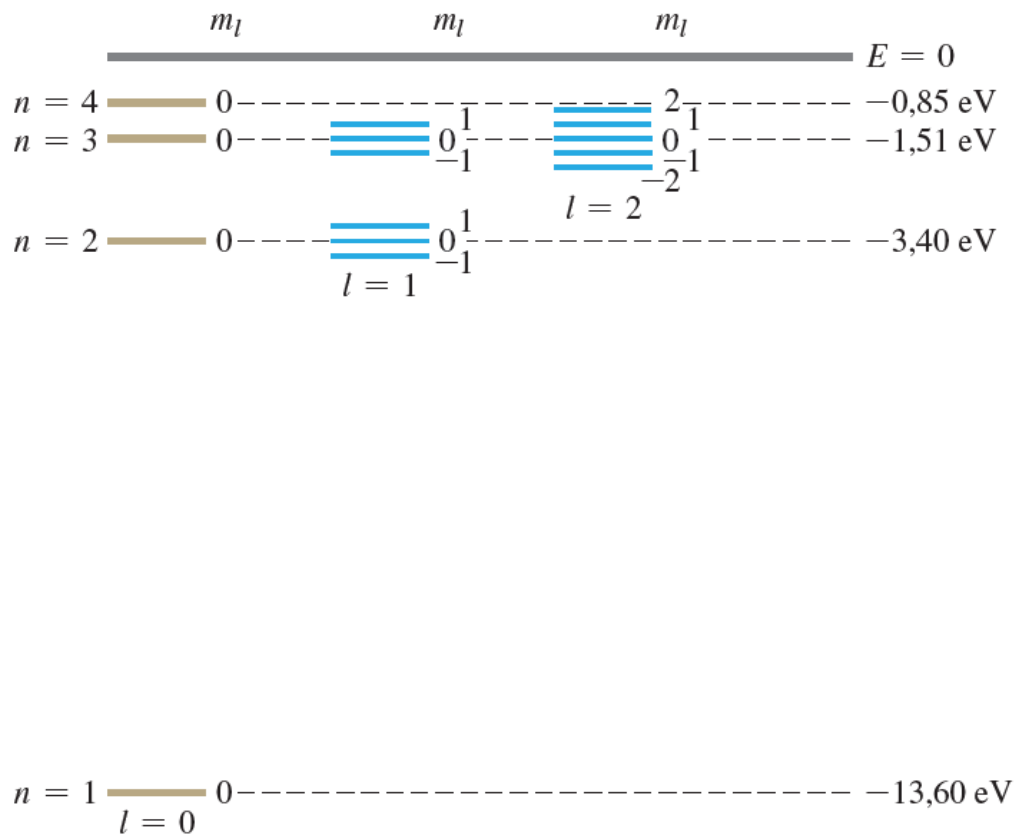


- ❑ A energia de interação U depende do valor de m_l , porque m_l determina a orientação do momento magnético orbital em relação ao campo magnético.
- ❑ Em razão dessa dependência, m_l é chamado de número quântico magnético
- ❑ Como m_l pode ter valores $-1, 0, 1 \Rightarrow$ O efeito do campo magnético consiste em deslocar a energia de cada estado orbital por um valor igual a U .
- ❑ Desdobramentos de linhas:

Efeito Zeeman: Desdobramento de uma linha na presença de um campo magnético.

Exemplo para $l = 2$ onde poderemos ter $m_l = -2, -1, 0, 1, 2$





- Os valores relativos dos desdobramentos estão exagerados para maior clareza.
- Os valores da diferença de energia são muito pequenos.

Um átomo no estado $\ell=1$ emite um fóton de comprimento de onda igual a 600,000 nm quando decai para um estado com $\ell=0$. Se o átomo está colocado em um campo magnético com módulo $B = 2,00 \text{ T}$, quais são os deslocamentos dos níveis de energia e dos comprimentos de onda resultantes da interação entre o campo magnético externo e o momento magnético orbital do átomo?

Energia do fóton:

$$E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{(4,14 \times 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}) (3,00 \times 10^8 \text{ m/s})}{600 \times 10^{-9} \text{ m}}$$

$$= 2,07 \text{ eV}$$

Para $\ell=0 \Rightarrow m_l=0$ e não temos deslocamento

Para $\ell=1 \Rightarrow m_l=-1, 0 \text{ e } 1$

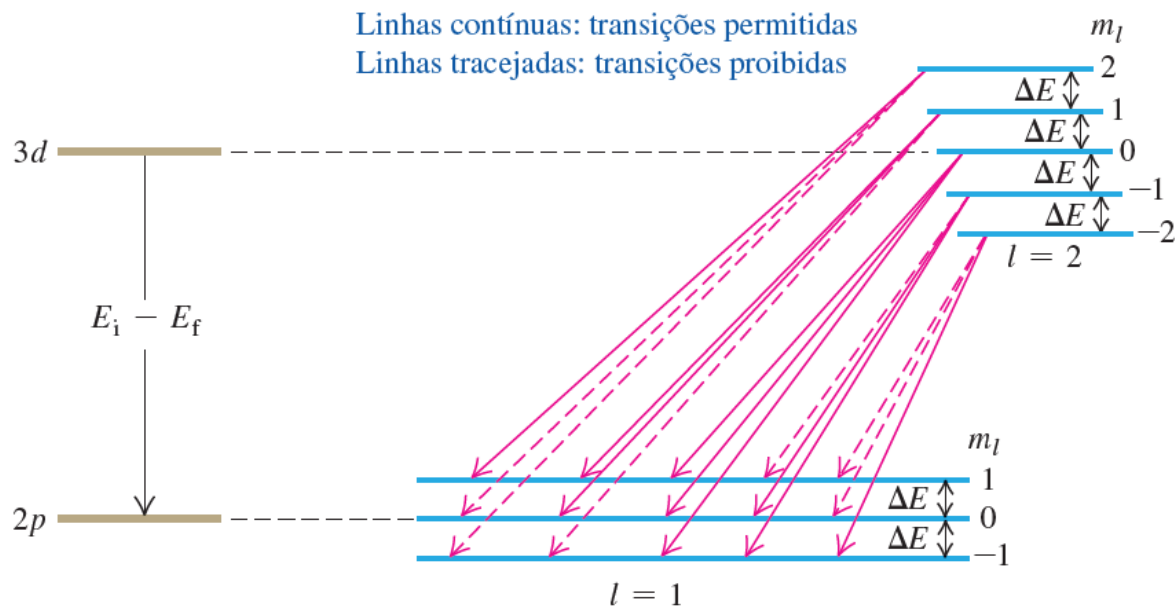
$$U = m_l \mu_B B = m_l (5,788 \times 10^{-5} \text{ eV/T}) (2,0 \text{ T})$$

$$= m_l (1,16 \times 10^{-4} \text{ eV}) = m_l \underbrace{(1,85 \times 10^{-23} \text{ J})}_{1,16 \times 10^{-4} \text{ eV}}$$

Essa energia representa uma fração muito pequena da energia de 2,07 eV do fóton

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{1,16 \times 10^{-4} \text{ eV}}{2,07 \text{ eV}} = 5,60 \times 10^{-5}$$

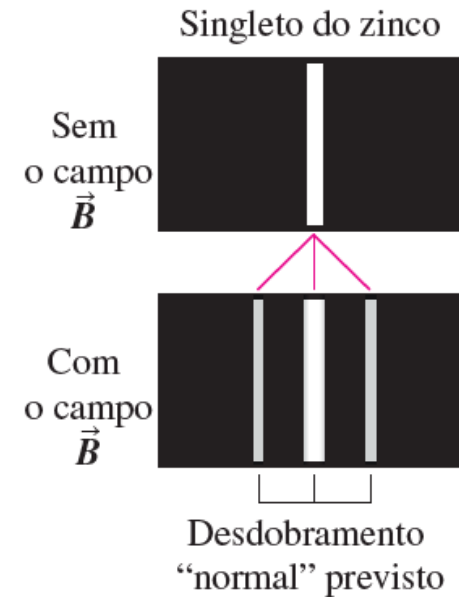
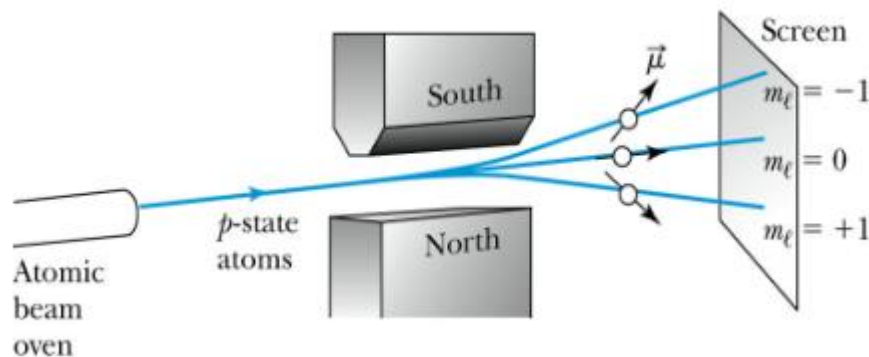
- ❑ No exemplo anterior consideramos uma transição de um $\ell=1$ para $\ell=0$.
- ❑ No entanto, nem todas transições são possíveis.
- ❑ Os fótons só conseguem carregar uma unidade de momento angular $1\hbar$
- ❑ Então apenas transições com $\Delta\ell = 1$ são permitidas.



- ❑ O efeito Zeeman *normal* é pautado na existência momento angular orbital do elétron.
- ❑ Prova a quantização do momento angular.
- ❑ Entretanto, não leva em consideração um ponto importante: o *spin* do elétron.

- ❑ Experiências foram feitas para comprovar esses comportamentos.
- ❑ Um feixe de átomos neutros deve passar através de um campo magnético,
- ❑ os átomos devem desviar de acordo com a orientação de seus momentos magnéticos em relação ao campo.
- ❑ Essas experiências demonstraram a quantização do momento angular.

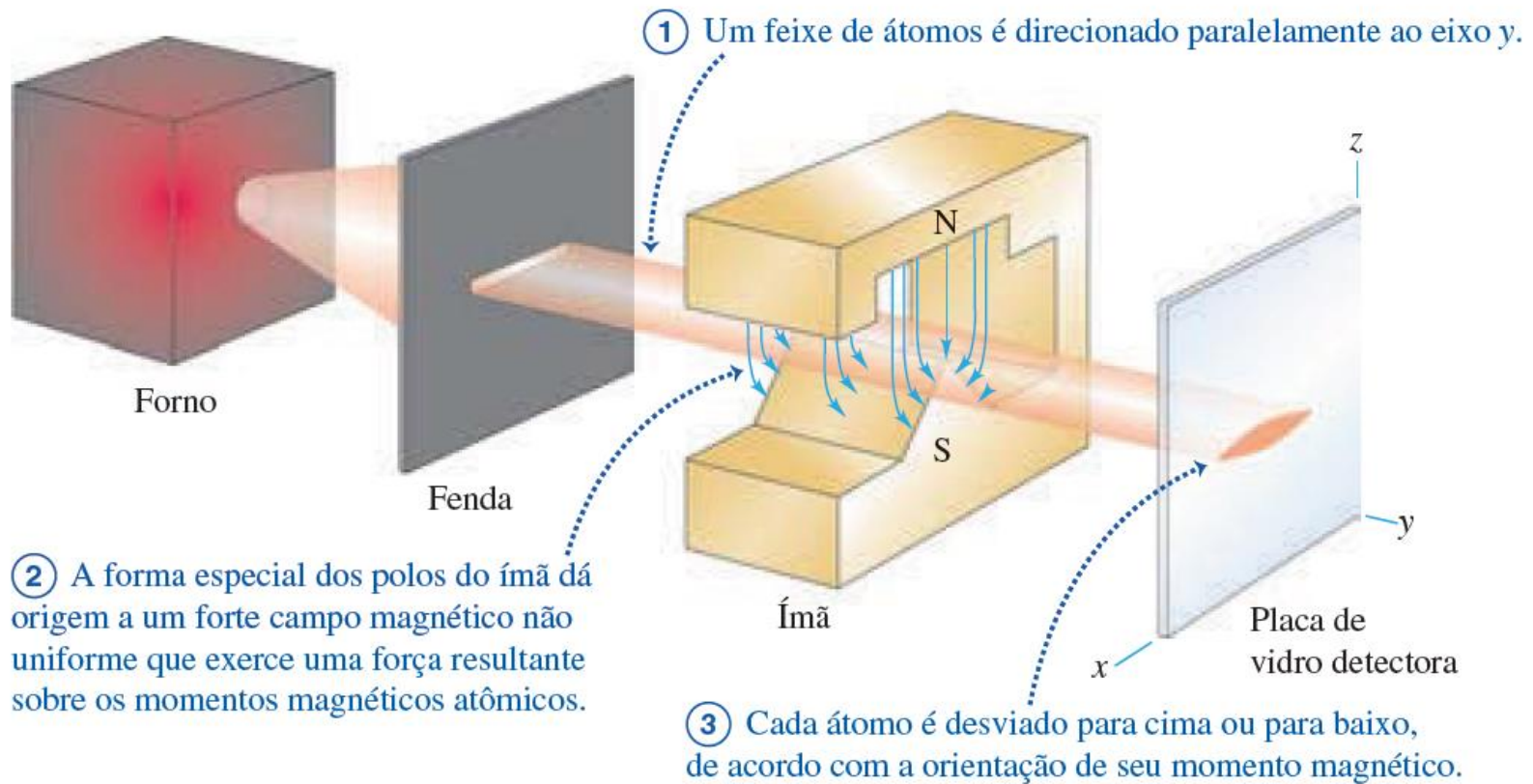
Caso existisse apenas o momento angular orbital, a ação do campo magnético produziria um desdobramento do feixe em um número ímpar $(2\ell+1)$ de componentes diferentes



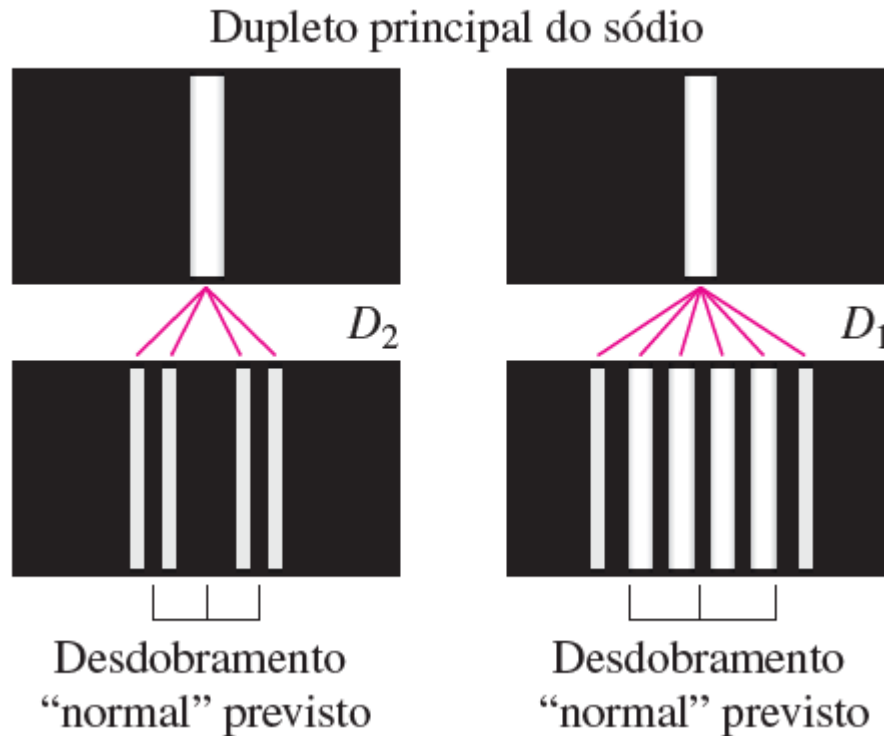
Padrão normal:
a experiência está de acordo com o desdobramento "normal" previsto.

1922 experiência do feixe de átomos realizada na Alemanha pelos físicos Otto Stern e Walter Gerlach

Figura 41.17 A experiência de Stern-Gerlach.



- ❑ No entanto, mais linhas foram observadas e foram chamadas de efeito Zeeman anômalo.



Padrão anômalo: a experiência não está de acordo com o desdobramento "normal" previsto.

- ❑ **Previsão números ímpares de linhas** => **observação números pares**

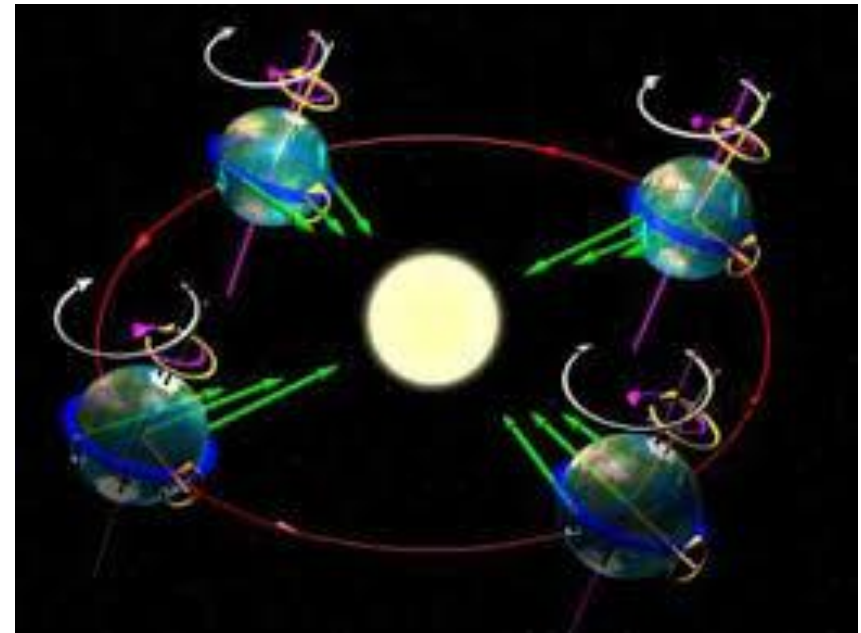
- ❑ desdobramento em um número ímpar ($2\ell+1$) de componentes diferentes

A existência de números pares de linhas para sugere que poderíamos ter $(2j+1)$ com $j=1/2, 3/2, 5/2, \dots$ ou seja números semi-inteiros para o momento angular do elétron

- ❑ Em 1925, dois estudantes de pós-graduação (Holanda), Samuel Goudsmidt e George Uhlenbeck, propuseram que o elétron deveria apresentar um movimento adicional.
- ❑ Usando um modelo semiclássico, eles sugeriram que o elétron pudesse se comportar como uma esfera carregada girando, em vez de se comportar como uma partícula puntiforme.
- ❑ Se isso fosse verdade, ele deveria possuir um momento angular de spin adicional e um momento magnético correspondente.
- ❑ Se essas grandezas fossem quantizadas de modo análogo ao do momento angular orbital e do momento magnético, elas poderiam ser úteis para explicar as anomalias observadas nos níveis de energia.

- ❑ A Terra descreve uma órbita circular em torno do Sol e, ao mesmo tempo, gira em torno de seu eixo.
- ❑ Cada um desses movimentos tem seu momento angular associado, que chamaremos, respectivamente, de momento angular orbital e momento angular de spin.
- ❑ O momento angular total da Terra é dado pela soma vetorial desses dois momentos angulares.

- ❑ Se imaginarmos um modelo no qual a Terra é um corpo puntiforme, ela não teria momento de inércia em torno de seu eixo de spin e, portanto, nenhum momento angular de spin.
- ❑ Porém, quando incluímos no modelo o tamanho finito da Terra, devemos considerar o momento angular de spin



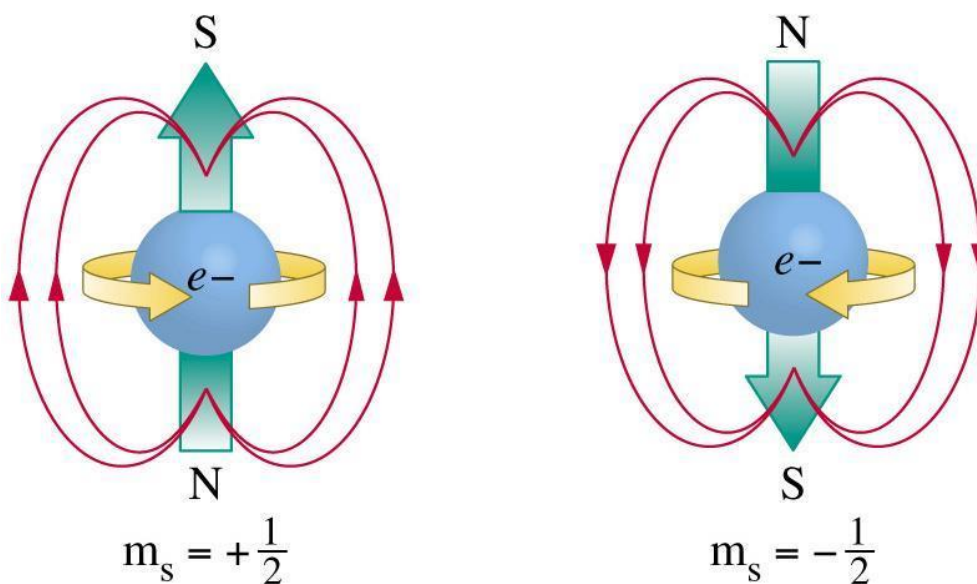
- ❑ Suponha que o elétron seja então uma pequena esfera girando em torno do próprio eixo ao longo de sua órbita.
- ❑ Então, além do momento angular orbital, ele também deve possuir um momento angular de *spin* associado a sua rotação em torno de um eixo próprio.
- ❑ Como a esfera é dotada de carga elétrica, seu movimento de rotação produz correntes e, portanto, surge um momento magnético associado.
- ❑ Em um campo magnético, o momento magnético de *spin* apresenta uma interação de energia além da produzida pelo momento magnético *orbital* (o efeito Zeeman normal). Portanto, deveremos observar desdobramentos Zeeman adicionais produzidos pelo momento magnético de *spin*

□ Spin do eletrón

Portanto, se $\bar{S} = \hbar\sqrt{s(s+1)}$ que leva a $\bar{S}_z = \hbar m_s$

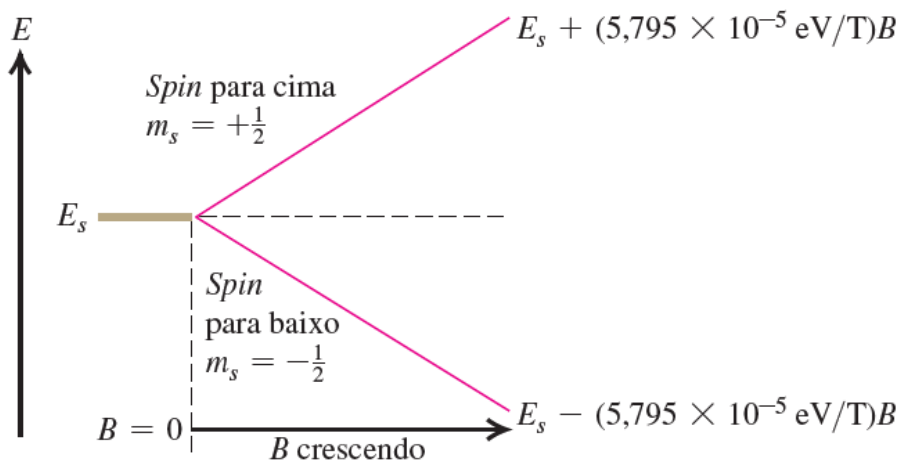
e $s = 1/2$ que leva a $m_s = -1/2$ e $+1/2$

chega-se aos resultados observados no experimento, com $g_s = 2$



número quântico magnético de *spin*.

Quando o átomo é colocado na presença de um campo magnético, a energia de interação do momento de dipolo magnético de *spin* com o campo produz um desdobramento adicional dos níveis de energia com um correspondente desdobramento das linhas espectrais.



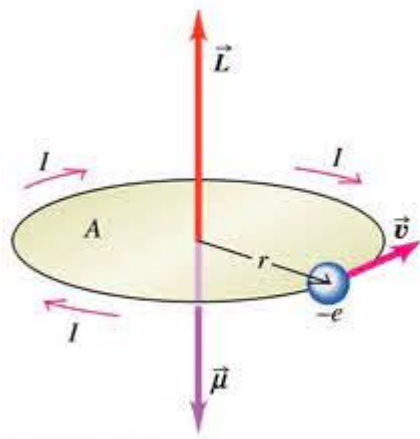
Combinando os momentos angulares orbital e de *spin*

O momento angular orbital e o momento angular de *spin* (respectivamente, \vec{L} e \vec{S}) podem ser combinados de diversas maneiras. A soma vetorial de \vec{L} e \vec{S} é o momento angular *total* \vec{J} , definido por:

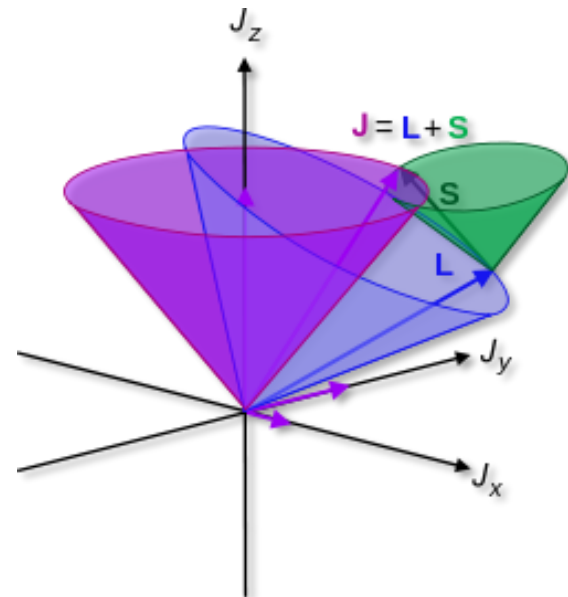
$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (41.39)$$

Os valores possíveis para o módulo J são dados com base no número quântico j , chamado **número quântico do momento angular total**:

$$J = \sqrt{j(j + 1)}\hbar \quad (41.40)$$



Copyright © Addison Wesley Longman, Inc.



Além dos deslocamentos nos níveis de energia decorrentes dos efeitos magnéticos dentro do átomo, existem deslocamentos da mesma magnitude decorrentes das correções relativísticas para a energia cinética do elétron.

Combinando esses efeitos os níveis de energia dos elétrons no átomo de hidrogênio é dada por:

Níveis de energia do hidrogênio, incluindo estrutura fina

Constante da estrutura fina

$$E_{n,j} = -\frac{13,60 \text{ eV}}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right]$$

Número quântico principal ($n = 1, 2, 3, \dots$)

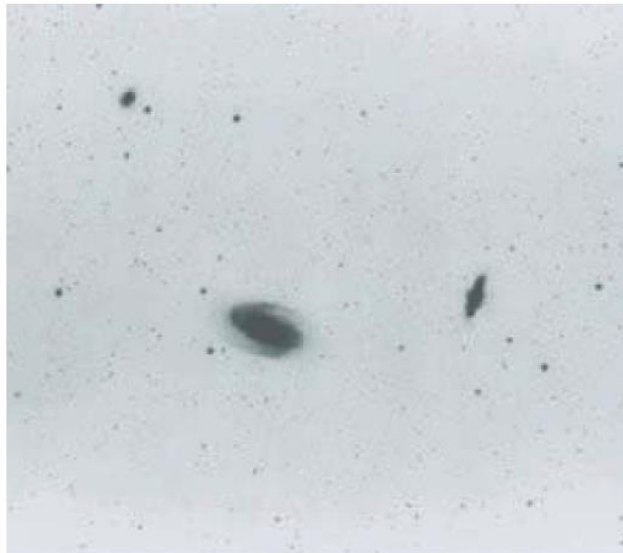
Número quântico do momento angular total

constante da estrutura fina $\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c} = 7,2973525698(24) \times 10^{-3}$

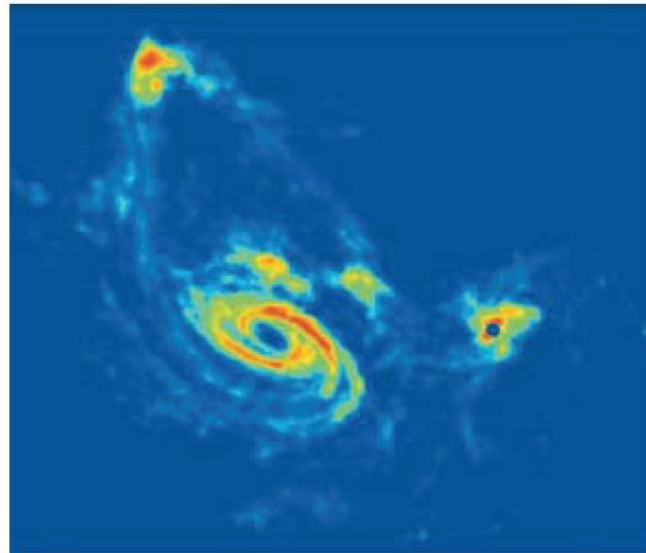
Outros desdobramentos muito menores estão associados com o fato de que o *núcleo* do átomo possui um momento dipolo magnético que interage com os momentos dipolos magnéticos orbitais e/ou do *spin* dos elétrons. Esses efeitos são chamados de *estrutura hiperfina*. Por exemplo, o nível fundamental do hidrogênio é desdobrado em dois estados, separados por apenas $5,9 \times 10^{-6}$ eV. O fóton emitido nas transições entre esses estados possui comprimento de onda de 21 cm. Os astrônomos de rádio usam esse comprimento de onda para mapear nuvens de gás de hidrogênio interestelares frias demais para emitir luz visível (**Figura 41.19**).

Figura 41.19 (a) Em uma imagem de luz visível, essas três galáxias distantes não parecem estar relacionadas. Mas, na verdade, elas estão conectadas por imensos aglomerados de gás hidrogênio. Isso é revelado pela (b) imagem de falsa cor produzida por um telescópio de rádio sintonizado para o comprimento de onda de 21 cm emitido por átomos de hidrogênio.

(a) Galáxias na luz visível (imagem negativa; as galáxias aparecem escuras)



(b) Imagem de rádio das mesmas galáxias no comprimento de onda de 21 cm



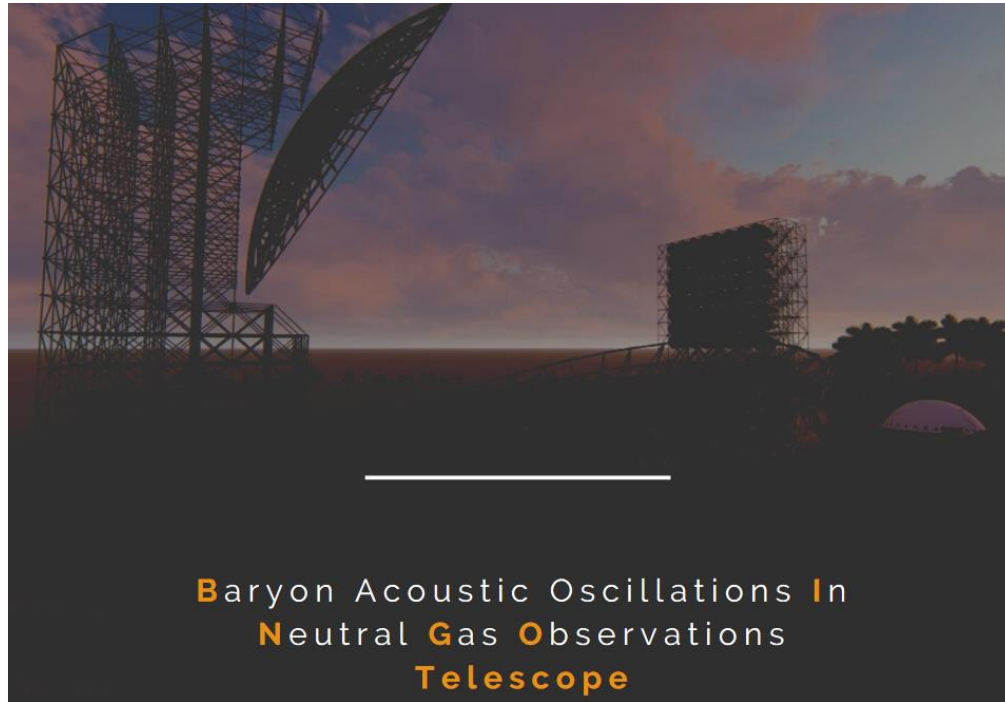


BINGO Telescópio

Baryon Acoustic Oscillations In Neutral Gas Observations



<https://www.bingotelescope.org/pt/>



Este projeto tem por objetivo investigar as oscilações acústicas bariônicas, através da detecção de hidrogênio atômico, o elemento mais abundante do Universo, na linha dos 21 cm (1.4 GHz), que devido ao "avermelhamento" causado pela expansão do Universo, é detectável na banda dos 960 a 1260 MHz em fontes que se encontrem a um redshift compreendido entre 0.13 e 0.48.

ÁTOMOS COM MUITOS ELÉTRONS E O PRINCÍPIO DE EXCLUSÃO

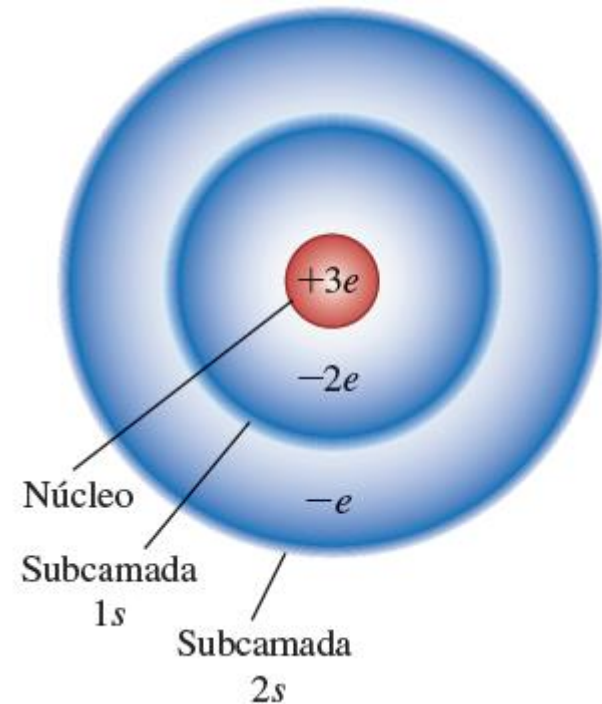
- ❑ Geralmente, quando um átomo está em seu estado normal (eletricamente neutro), ele possui Z elétrons e Z prótons. A carga elétrica total desse átomo é igual a zero.
- ❑ Para um completo entendimento desse átomo é necessário conhecer a função de onda que descreve o comportamento de todos os Z de seus elétrons.
- ❑ A função de onda depende das 3 coordenadas (três para cada elétron), sua complexidade aumenta muito rapidamente com o aumento de Z .
- ❑ Além disso, cada um dos Z elétrons interage não só com o núcleo, mas também com os demais elétrons.
- ❑ A energia potencial, portanto, é uma função complexa de 3 coordenadas e a equação de Schrödinger contém derivadas de segunda ordem em relação a todas essas variáveis.
- ❑ O problema matemático de obter uma solução para esse tipo de equação é tão complexo que ainda não foi resolvido completamente nem para o átomo de hélio neutro, que possui apenas dois elétrons.

❑ Aproximações

- ❑ Desprezamos a interação de um elétron com o outro e consideramos apenas a interação do elétron com o núcleo

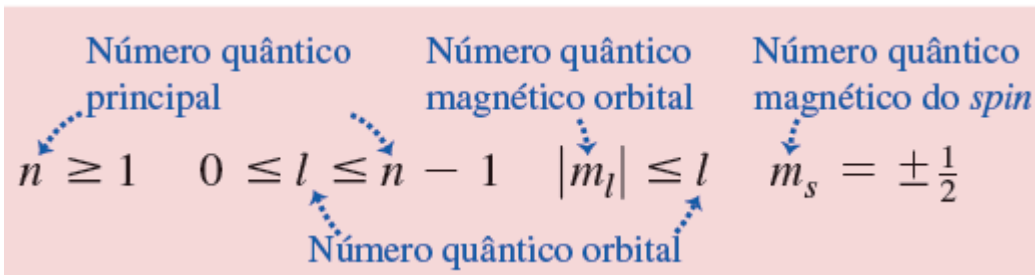
$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{m_r Z^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} = -\frac{Z^2}{n^2} (13,6 \text{ eV})$$

- ❑ Essa aproximação é drástica e não funciona muito bem.



A aproximação de campo central

- ❑ consiste em imaginar que todos os elétrons constituem uma nuvem eletrônica que, na média, é esfericamente simétrica.
- ❑ A seguir, imaginamos que cada elétron se move sob a ação do campo elétrico resultante da soma do campo elétrico do núcleo com o campo elétrico médio da nuvem eletrônica dos outros elétrons.
- ❑ Existe uma função correspondente esfericamente simétrica $U(r)$ para a energia potencial.
- ❑ Na aproximação de campo central, novamente podemos considerar a função de onda de apenas um elétron.
- ❑ Portanto os números quânticos são os mesmos:



O princípio de exclusão

- ❑ Para entender a estrutura de átomos com muitos elétrons, precisamos de uma regra adicional, conhecida como *princípio de exclusão*
- ❑ Wolfgang Pauli em 1925 estabelece o princípio de exclusão.
- ❑ Esse princípio afirma que dois elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico em um dado sistema.
- ❑ Ou seja, dois elétrons não podem ter os mesmos valores para os quatro números quânticos (n , l , m_l , m_s).
- ❑ Para cada estado, m_s só pode ser igual a $+1/2$ ou $-1/2$

TABELA 41.2 Estados quânticos de elétrons nas quatro primeiras camadas.

n	L	m_l	Notação espectroscópica	Número de estados		Camada
1	0	0	$1s$	2		K
2	0	0	$2s$	2	8	L
2	1	-1, 0, 1	$2p$	6		
3	0	0	$3s$	2	18	M
3	1	-1, 0, 1	$3p$	6		
3	2	-2, -1, 0, 1, 2	$3d$	10		
4	0	0	$4s$	2	32	N
4	1	-1, 0, 1	$4p$	6		
4	2	-2, -1, 0, 1, 2	$4d$	10		
4	3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	$4f$	14		

A tabela periódica

TABELA 41.3 Configuração eletrônica do estado fundamental dos elementos.

Elemento	Símbolo	Número atômico (Z)	Configuração eletrônica
Hidrogênio	H	1	$1s$
Hélio	He	2	$1s^2$
Lítio	Li	3	$1s^2 2s$
Berílio	Be	4	$1s^2 2s^2$
Boro	B	5	$1s^2 2s^2 2p$
Carbono	C	6	$1s^2 2s^2 2p^2$
Nitrogênio	N	7	$1s^2 2s^2 2p^3$
Oxigênio	O	8	$1s^2 2s^2 2p^4$
Flúor	F	9	$1s^2 2s^2 2p^5$
Neônio	Ne	10	$1s^2 2s^2 2p^6$
Sódio	Na	11	$1s^2 2s^2 2p^6 3s$
Magnésio	Mg	12	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
Alumínio	Al	13	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p$
Silício	Si	14	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$
Fósforo	P	15	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$
Enxofre	S	16	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$
Cloro	Cl	17	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$
Argônio	Ar	18	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
Potássio	K	19	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s$
Cálcio	Ca	20	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$
Escândio	Sc	21	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d$
Titânio	Ti	22	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^2$
Vanádio	V	23	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^3$
Cromo	Cr	24	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s 3d^5$
Manganês	Mn	25	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^5$
Ferro	Fe	26	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$
Cobalto	Co	27	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^7$
Níquel	Ni	28	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^8$
Cobre	Cu	29	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s 3d^{10}$
Zinco	Zn	30	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10}$