Capítulo 41(43): Estrutura Atômica

- <u>Número de aulas:</u> **4 aulas**
- <u>Seções do livro texto:</u> *41.1 O Átomo de Hidrogênio; 41.2 O Efeito Zeeman; 41.3 O Spin do Elétron e 41.4 Átomos com Muitos Elétrons e o Princípio de Exclusão (43.1 a 43.5).*
- <u>Exercícios sugeridos:</u> 41.4(43.2), 41.6(43.4), 41.8(43.6), 41.15(43.13), 41.23(43.21), 41.24(43.24), 41.25(43.25), 41.41(43.35), 41.43(43.37).

41.4 Considere estados com número quântico do momento angular $l = 2$. a) Qual é o maior valor possível de L em unidades de $\hbar$? b) Qual dos dois possui valor maior, L ou o maior valor possível de L_z? c) Para cada valor permitido de L_z qual é o ângulo entre o vetor $\vec{L}$ e o eixo Oz? Como se compara o valor mínimo do ângulo para $l = 2$ com o valor mínimo do ângulo para $l = 3$ calculado no Exemplo 41.2 (Seção 41.2)?

Exemplo 41.2

MOMENTO ANGULAR DE UM NÍVEL EXCITADO DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO Considere os estados $n = 4$ do hidrogênio. a) Qual é o módulo máximo L do momento angular orbital? b) Qual é o valor máximo de L_z? c) Qual é o ângulo mínimo entre $\vec{L}$ e o eixo Oz? Dê a resposta dos itens (a) e (b) em termos de $\hbar$.

SOLUÇÃO

IDENTIFICAR: mais uma vez, o problema pede para relacionarmos o número quântico principal n e o número quântico orbital l em um átomo de hidrogênio. Precisamos também encontrar a relação entre o valor de l e o módulo, bem como as possíveis direções e os sentidos do vetor momento angular orbital.

PREPARAR: usaremos a Equação (41.4) na parte (a) para calcular o valor máximo de L, e depois a Equação (41.5) na parte (b) para determinar o valor máximo de L_z. O ângulo mínimo entre $\vec{L}$ e o eixo Oz ocorre quando L_z é máximo (de forma que $\vec{L}$ esteja quase alinhado com o eixo Oz positivo).

EXECUTAR: a) Quando $n = 4$, o valor máximo do número quântico do momento angular orbital l é igual a $(n - 1) = (4 - 1) = 3$; de acordo com a Equação (41.4),

$$L = \sqrt{3(3+1)}\hbar = \sqrt{12}\hbar = 3{,}464\hbar$$

b) Para $l = 3$, o valor máximo do número quântico magnético m_l é igual a 3; de acordo com a Equação (41.5),

$$L_z = 3\hbar$$

c) O ângulo *mínimo* entre $\vec{L}$ e o eixo Oz corresponde aos valores *máximos* permitidos para L_z e m_l (a Figura 41.2b mostra um exemplo para $l = 2$). Para o estado com $l = 3$ e $m_l = 3$,

$$\theta_{\text{mín}} = \arccos\frac{(L_z)_{\text{máx}}}{L} = \arccos\frac{3\hbar}{3{,}464\hbar} = 30{,}0°$$

AVALIAR: convidamos você a verificar que os ângulos são maiores do que 30,0° em todos os estados com valores menores de l.

41.6 a) Faça uma tabela mostrando todos os conjuntos de números quânticos l e m_l possíveis para os estados do elétron no átomo de hidrogênio quando $n = 5$. Quantas combinações existem? Quais são as energias desses estados?

41.8 a) Qual é a probabilidade de que um elétron seja encontrado no estado 1s do átomo de hidrogênio a uma distância menor do que $a/2$ do núcleo? b) Use os resultados do item (a) e o Exemplo 41.3 (Seção 41.1) para calcular a probabilidade de o elétron ser encontrado a uma distância entre $a/2$ e a do núcleo.

Exemplo 41.3

UMA FUNÇÃO DE ONDA PARA O HIDROGÊNIO A função de onda para o estado fundamental do átomo de hidrogênio (o estado 1*s*) é

$$\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$$

a) Mostre que essa função de onda é normalizada. b) Qual é a probabilidade de um elétron se encontrar a uma distância menor do que a em relação ao núcleo?

SOLUÇÃO

IDENTIFICAR: precisamos mostrar que essa função de onda satisfaz a condição de que a probabilidade de encontrar o elétron *em algum lugar* é 1. Precisamos, a seguir, encontrar a probabilidade de que o elétron seja encontrado na região $r < a$.

PREPARAR: na parte (a), calculamos a integral $\int |\psi|^2\, dV$ sobre todo o espaço; se ela for igual a 1, a função de onda é normalizada. Na parte (b), calculamos a mesma integral sobre um volume esférico que se estende da origem (o núcleo) até uma distância a do núcleo.

EXECUTAR: a) Como a função de onda depende apenas da coordenada radial r, podemos supor que nossos elementos de volume são camadas esféricas de raio r, espessura dr e volume dV dados pela Equação (41.6). Obtemos, então,

$$\int_{\substack{\text{todo o}\\ \text{espaço}}} |\psi_{1s}|^2\, dV = \int_0^\infty \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a}(4\pi r^2\, dr) = \frac{4}{a^3}\int_0^\infty r^2 e^{-2r/a}\, dr$$

A seguinte integral indefinida pode ser obtida fazendo a integral anterior por partes ou por meio de uma tabela de integrais:

$$\int r^2 e^{-2r/a}\, dr = \left(-\frac{ar^2}{2} - \frac{a^2 r}{2} - \frac{a^3}{4}\right)e^{-2r/a}$$

O cálculo entre os limites $r = 0$ e $r = \infty$ é simples; a expressão se anula para $r = \infty$ por causa do fator exponencial, e para $r = 0$ somente o último termo entre parênteses não se anula. Portanto, o valor da integral é igual a $a^3/4$. Substituindo todos esses valores, obtemos

$$\int_0^\infty |\psi_{1s}|^2\, dV = \frac{4}{a^3}\int_0^\infty r^2 e^{-2r/a}\, dr = \frac{4}{a^3}\frac{a^3}{4} = 1$$

Portanto, a função de onda *está* normalizada.

b) Para determinar a probabilidade P de o elétron se encontrar na região em que $r < a$, calculamos a mesma integral anterior, porém, os limites agora são 0 e a. Deixaremos o desenvolvimento a seu encargo (ver Exercício 41.13). Usando o limite superior da integral, obtemos $-5e^{-2}a^3/4$; o resultado final é.

$$P = \int_0^a |\psi_{1s}|^2 4\pi r^2\, dr = \frac{4}{a^3}\left(-\frac{5a^3e^{-2}}{4} + \frac{a^3}{4}\right)$$
$$= 1 - 5e^{-2} = 0{,}323$$

AVALIAR: de acordo com os resultados obtidos, no estado fundamental esperamos encontrar o elétron a uma distância menor do que a em relação ao núcleo cerca de $\frac{1}{3}$ do tempo e a uma distância maior do que a cerca de $\frac{2}{3}$ do tempo. É difícil de visualizar, mas na Figura 41.4 cerca de $\frac{2}{3}$ da área embaixo da curva 1*s* estão situados em distâncias maiores do que a (ou seja, $r/a > 1$).

41.15 Um átomo de hidrogênio no estado 5*g* é colocado em um campo magnético de 0,600 T situado na direção *z*. a) Em quantos níveis o estado se desdobra por causa da interação do campo magnético com o momento de dipolo magnético orbital do átomo? b) Qual é a diferença de energia entre dois níveis adjacentes? c) Qual é a diferença de energia entre o nível mais elevado e o nível mais baixo?

41.23 Modelo clássico do spin do elétron. a) Se você imaginar o elétron como uma esfera clássica com raio igual a $1{,}0 \times 10^{-17}$ m, qual será a velocidade angular necessária para produzir um momento angular de spin de módulo igual a $\sqrt{\frac{3}{4}}\hbar$? b) Use $v = r\omega$ e o resultado do item (a) para calcular o módulo da velocidade v no equador do elétron. O que seu resultado informa sobre a validade desse modelo?

41.24 Para o germânio (Ge, $Z = 32$), faça uma lista do número de elétrons de cada subcamada (1*s*, 2*s*, 2*p*...). Use os valores permitidos dos números quânticos e o princípio de exclusão; *não* consulte a Tabela 41.3.

41.25 Faça uma lista dos quatro números quânticos n, l, m_l e m_s para cada um dos dez elétrons no estado fundamental do átomo de neônio. *Não* consulte a Tabela 41.2 nem a Tabela 41.3.

41.41 A função de onda para o átomo de hidrogênio no estado $2s$ é dada por

$$\psi_{2s}(r) = \frac{1}{\sqrt{32\pi a^3}}\left(2 - \frac{r}{a}\right)e^{-r/2a}$$

a) Mostre que essa função de onda é normalizada. b) No modelo de Bohr, a distância entre o elétron e o núcleo no estado $2s$ é exatamente igual a $4a$. Calcule a probabilidade de que um elétron no estado $2s$ seja encontrado a uma distância em relação ao núcleo menor do que $4a$.

41.43 Para um estado excitado do átomo de hidrogênio, mostre que o menor ângulo que o momento angular orbital $\vec{L}$ pode formar com o eixo Oz é dado por

$$(\theta_L)_{\text{mín}} = \arccos\left(\frac{n-1}{\sqrt{n(n-1)}}\right)$$

b) Qual é a expressão correspondente do maior ângulo que o momento angular orbital $\vec{L}$ pode formar com o eixo Oz?