

JOSÉ EDSON CAVALCANTE
DA SILVA

CONTEXTO AVALIATIVO.

^ ATÔMICA

FÍSICA MODERNA

UMA ANÁLISE CRÍTICA



EDITORA EDFIKA

ENCONTRAMOS NESTE LIVRO, O RESUMO FEITO A PARTIR DE UM ESTUDO ANALÍTICO DO CAPÍTULO 7 DE FÍSICA MODERNA, ABORDANDO O CONCEITO GERAL DE FÍSICA ATÔMICA E SUAS PARTICULARIDADES NO CONTEXTO CIENTÍFICO E ACADÊMICO DENTRO DE UM PROCESSO AVALIATIVO NA FORMAÇÃO DE MESTRADO POR PARTE DO AUTOR DESTA OBRA.



9 786585 231091



EDITORA EDIFIKA

ATÔMICA

Física Moderna

Uma análise crítica

© COPYRIGHT 2023 BY JOSÉ EDSON CAVALCANTE DA SILVA.

Edição: Ellen Maiane Santos Melo.

Diagramação: José E. C. Silva.

Criação da Capa: JECS Design.

Capa: JECS Design.

FICHA CATALOGRÁFICA

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

S586a

Silva, José Edson Cavalcante da.

Atômica: Física Moderna – Uma análise crítica (Contexto avaliativo) / José Edson Cavalcante da Silva. – Arapiraca / Alagoas: Editora EdFika, 2023.

40 p.

ISBN: 978-65-85231-09-1.

1. Schrödinger
 2. Átomo.
 3. Tabela Periódica
 4. Hidrogênio.
 5. Efeito Zeeman.
- I. Título. II. Autor.

CDD 539

Índices para catálogo sistemático:

1. 539 – Física moderna

*Ficha catalográfica elaborada por:
José Edson Cavalcante da Silva*



Esta obra é licenciada sob uma Licença
Creative Commons Attribution-ShareAlike4.0 Brasil.



EDITORA EDFIKA

José Edson Cavalcante da Silva

ATÔMICA

Física Moderna

Uma análise crítica



EDITORA EDFIKA

2023



COMITÊ EDITORIAL

Me. Maria Fabiana Brito Santos – SEMED – Maceió

Dr^a. Elizabete Amorim de Almeida Melo – UFAL

Dr. Jenivaldo Lisboa de Araújo – SEDUC/AL

Dr. Elias Rocha Goncalves - SEEDUC/RJ

Dr^a. Ellen Maianne Santos Melo - IFAL

“O mundo observado é apenas uma aparência; na realidade, nem sequer existe. A filosofia dos Vedas tentou ilustrar este seu dogma fundamental através de várias metáforas”.

Erwin Schrödinger

(Nobel da Física)

APRESENTAÇÃO

Através de uma seleção junto à Universidade Federal de Alagoas – UFAL, Campus Maceió, ingressei para cursar três disciplinas rumo ao mestrado em Física Quântica. As disciplinas foram: Física Matemática, Eletromagnetismo e Física Moderna. Foi a partir dos estudos feitos em Física Moderna, sob a orientação do Prof. Francisco Fidelis, que tive a oportunidade de resumir e executar uma análise crítica do capítulo 7 do livro desta disciplina, para o qual seu resultado se encontra aqui nesta publicação denominada Atômica: Física Moderna (Uma análise crítica), tido como um instrumento avaliativo para os meus estudos.

O que encontramos aqui neste livro, é o resumo em forma de análise colocando em poucas palavras o conceito de dimensões esféricas a partir da Equação de Schrödinger, o movimento angular, a energia e as ondas do átomo de Hidrogênio através de fórmulas, bem como a rotação Spin de um Elétron e os movimentos angulares do efeito Spin-órbita. Podemos fundamentar o estado dos átomos na Tabela Periódica, segundo a Física Atômica e o estado excitado e espectrais dos átomos alcalinos e de dois elétrons, fechando com os conceitos do Efeito Zeeman à luz da Física Moderna.

Através do texto de conclusão e nas referências, que podemos nos embasar neste contexto avaliativo segundo a análise crítica da Física Atômica através dos conhecimentos da Física Moderna.

Prof. Esp. José Edson Cavalcante da Silva.

SUMÁRIO

PREFÁCIO.....	11
APRESENTAÇÃO.....	12
CAPÍTULO I: EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM COORDENADAS ESFÉRICAS.....	14
CAPÍTULO II: QUANTIZAÇÃO DO MOMENTO ANGULAR E ENERGIA NO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO...16	
CAPÍTULO III: FUNÇÕES DE ONDA DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO.....	20
CAPÍTULO IV: SPIN DO ELÉTRON.....	22
CAPÍTULO V: ADIÇÃO DE MOMENTOS ANGULARES E EFEITO SPIN-ÓRBITA.....	25
CAPÍTULO VI: ESTADOS FUNDAMENTAIS DE ÁTOMOS; A TABELA PERIÓDICA.....	27
CAPÍTULO VII: ESTADOS EXCITADOS E ESPECTROS DOS ÁTOMOS ALCALINOS.....	29
CAPÍTULO VIII: ESTADOS EXCITADOS E ESPECTROS DE ÁTOMOS DE DOIS ELÉTRONS.....	31
CAPÍTULO IX: O EFEITO ZEEMAN.....	33
CONCLUSÃO.....	37
REFERÊNCIAS.....	39

PREFÁCIO

Em toda a trajetória de evolução da ciência, o mundo todo tem perguntado sobre seus mais incríveis mistérios, que com desabrochar da física moderna, essas respostas vão fluindo gradativamente com o tempo através das teorias quânticas que buscam, cada vez mais, enfatizar a transcendência do conhecimento.

Neste trabalho procuramos abordar a origem dos números quânticos m , l e n , bem como seus possíveis valores em relação à quantização do momento angular e de energia; esboçar a função de onda e as funções de distribuição de probabilidade para o estado fundamental do hidrogênio; discutir semelhanças e diferenças entre o modelo de Bohr e o tratamento da equação de Schroedinger para o átomo de hidrogênio; fazer a ligação entre o átomo de hidrogênio; fazer a ligação entre o momento magnético e o momento angular; descrever a experiência de Stern-Gerlach; relacionar a combinação de dois vetores momento angular; discutir o efeito Spin-órbita; fazer uma discussão sobre o efeito se Spin do elétron numa tabela periódica entendendo a origem das configurações eletrônicas dos átomos; compreender as características gerais do gráfico de nível de energia de um átomo de um elétron, em especial o sódio, e de dois elétrons, como o mercúrio; discutir o efeito Zeeman, fazendo a comparação entre os efeitos Zeeman normal e anômalo, abordando suas teorias e experimentos.

APRESENTAÇÃO

Aplicando a teoria quântica para os sistemas atômicos, compreendemos que a equação de Schrödinger verifica solução exatamente para o átomo de hidrogênio. A importância de considerarmos o átomo de hidrogênio é que suas considerações atômicas superam átomos simples, aproximando os seus conceitos de ondas dos átomos mais complicadas. O sucesso da equação de Schroedinger no campo da física atômica deve-se ao estudo da interação dos elétrons entre si e com o núcleo atômico, expressando bastante ênfase com os seus níveis de energia, os comprimentos de ondas e as intensidades de seus aspectos, podendo ser calculados através de métodos de aproximação e computacionais. A equação de Schroedinger foi resolvida pela primeira vez em 1924 em resolução para o átomo de hidrogênio. O estudo do átomo de hidrogênio é destacado no estudo da teoria atômica por ser mais complicado do que os sistemas constituídos de duas partículas, estudo esse que se caracteriza como sistemas movendo-se no espaço tridimensional sob a influência de uma atração coulombiana mútua. O movimento angular é um exemplo desse tipo de sistema. Segundo Bohr, trata-se de um conjunto elétron-núcleo com um sistema de dois corpos em movimento com um centro da massa em repouso, com massa reduzida, por

$$\mu = \frac{mM}{m+M}$$
, onde m é a massa do elétron e M , a massa do núcleo. A energia potencial do sistema dependerá da

posição radial r do elétron em relação ao núcleo,

dada por $V(r) = -\frac{Zke^2}{r}$, para o sistema elétron-núcleo quando mantido ligado por uma força de atração coulombiana entre as cargas $-e$ e $+Ze$. Negativo (-), por se tratar de um problema de força central, onde veremos mais adiante. Nestas condições, a dependência radial da energia potencial, o problema possui uma simetria esférica, tratada na solução da equação de Schrödinger, em que discutiremos qualitativamente as características importantes destes resultados, que através de argumentos tão simples, tornaremos plausíveis e de grande importância os resultados obtidos. Portanto, é nesse campo da física Atômica que encontraremos satisfação em abordar tópicos imprescindíveis para o estudo da Teoria Quântica para sistemas atômicos.

CAPÍTULO I

EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER EM COORDENADAS ESFÉRICAS

Inicialmente tratamos o átomo de hidrogênio como uma única partícula, logo um elétron se movendo com energia cin. p^2/m_e e energia potencial $v(r) = -zke^2/r$, pois segundo a teoria de Bohr, o fator z é considerado o número atômico, que para o hidrogênio é 1. Devendo levar em consideração o movimento do núcleo. Nestas condições, a equação de Schroedinger no espaço tridimensional é representada pela equação:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V\psi = E\psi$$

A energia potencial depende do radial $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$, que nas coordenadas esféricas, r , θ , ϕ , estão relacionados com x , y e z , por $z = r \cos\theta$, $x = r \sin\theta \cos\phi$ e $y = r \sin\theta \sin\phi$. Nestas condições, a transformação da equação de Schroedinger em coordenadas esféricas é pelo seguinte resultado:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \\ & - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] \\ & + V\psi = E\psi \end{aligned}$$

Equação esta que não foi difícil para Schroedinger resolvê-la, por ser bem similar a outras equações diferenciais parciais relacionadas à Física Clássica.

Com relação à ψ , devemos lembrar que no caso $\psi(x,$

y, z, t) é um estado estacionário por se relacionar a uma densidade de probabilidade independente do tempo.

CAPITULO II

QUANTIZAÇÃO DO MOMENTO ANGULAR E ENERGIA NO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO

A importância de discutir a quantização do momento angular e da energia na solução da equação de Schroedinger é compreender a origem e interpretação dos números quânticos n , l e m , mediante as formas matemáticas das funções de onda do átomo de hidrogênio.

Começamos separando as variáveis escrevendo a função de onda $\psi(r, \theta, \varphi)$ como produto de um a variável a partir de uma equação diferencial parcial.

Assim escrevemos $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)f(\theta)g(\varphi)$, em que R depende de r , f depende de θ e g depende de φ , que para as equações diferenciais parciais podem ser transformadas em três equações diferenciais ordinárias, $R(r)$, $f(\theta)$ e $g(\varphi)$, uma para cada função. A energia potencial aparece somente na equação para $R(r)$, considerada equação radial. Nestas condições, o requisito de que a função de onde seja bem comportada, de modo que seja continua e possa ser normalizada, introduz três números quânticos, cada qual associado a uma das três variáveis. Com isso, o número quântico associado a φ é m e está relacionado com a componente z do momento angular, dado por $L_z = m\hbar$. Para $g(\varphi)$, o valor de φ está restrito entre $\varphi = 0$ e $\varphi = 360^\circ$. Com isso, a condição de contorno de φ leva a condição quântica na componente z do momento angular, associando a um campo magnético externo a fim de observar a quantização

desta componente z (eixo z coord. \emptyset).

O número quântico associado a θ é chamado l e está relacionado com a

magnitude do momento angular e está relacionado com a magnitude do momento angular L , dado por

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

A solução das partes angulares da equação de Schrödinger leva à quantização

do momento angular L e da componente L_z . De modo análogo à mecânica clássica, quando V depende de \mathbf{r} , a força é dirigida para a origem, afastando-se dela, e o momento angular L é constante, em que no momento angular de Bohr para o átomo de hidrogênio, é o postulado da quantização do momento angular que leva a valores discretos de energia. Os resultados corretos da equação de Schrödinger, nesse caso, diferem do postulado de Bohr. Muito embora a componente Z do momento angular seja um múltiplo inteiro de \hbar , diferente para a magnitude do momento angular, onde em

$$\sqrt{l(l+1)}\hbar, \quad l \text{ é inteiro.}$$

Discutindo os resultados para qualquer sistema esférico, em que a energia potencial depende de \mathbf{r} , a solução da equação radial para $R(r)$ depende de $V(r)$. Nestas condições, o número quântico associado à coordenada r é chamado número quântico principal n . Portanto, para certos valores de E , resolvendo a equação radial, temos:
$$E_n = -\frac{Z^2 E_0}{n^2}$$

O número quântico principal n pode tomar os valores $n= 1, 2, 3, \dots$; contanto que $n > l$. Com isso, os valores quânticos n, l em associados as variáveis r, θ, \emptyset estão para:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = 0, 1, 2, \dots (n-1)$$

$$m = -l, -l+1, \dots, 0, 1, 2, \dots, +l.$$

A energia do átomo de hidrogênio depende do número quântico principal n e não de l , isso gera uma peculiaridade de forças inversas. Como resultado da mecânica clássica a energia depende do eixo maior da órbita e não da excentricidade. Ao maior valor do momento angular ($l = n-1$) corresponde à órbita circular, enquanto que o pequeno valor de l , a uma órbita excêntrica. Para forças centrais que não obedecem a lei quadrática inversa, a energia depende do momento angular que depende tanto de n quanto de l .

O número quântico de m está relacionado com a componente z do momento angular. Assim se colocarmos um átomo num campo magnético externo, haverá uma direção preferencial no espaço, e a energia dependerá do valor de m , a ser discutido pelo efeito Zeeman. As transições de dipolo elétrico permitidas obedecem às regras de seleção $\Delta m = 0$ e $\Delta l = \pm 1$.

Poderemos fazer uma ligação entre os números quânticos, l e m , e o momento

angular é bem mais valorizado para a equação de Schroedinger, onde $\frac{d^2 g}{d\phi^2} = -m^2 g(\phi)$, considerando as três equações diferenciais para $R(r)$, $f(\theta)$ e $g(\phi)$, onde m é uma constante na separação de variáveis, em que a solução dessa equação é $e^{im\phi}$, para ϕ

$= 0$ e $\phi = 2\pi$, portanto:

$$e^{im\phi} = e^{i(m/P)\phi} = e^{ik_s\phi},$$

onde $m/P = K_s$, então $m = PK_s$ e $m\hbar = P\hbar K_s$ é a componente z do momento angular. Considerando $f(\theta)$, esta é muito complexa, tendo como padrão da física matemática na equação de Legendre, para $\theta = 0$ e em $\theta = 180^\circ$, l é restrito a valores inteiros. Com isso, a equação diferencial para $R(r)$ é:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] R = ER$$

Comparando a equação clássica para energia total $E = p^2/2\mu + V(r)$. Escrevendo p em termos de suas componentes p_r ao longo do raio r e p_\perp perpendicular a r , $L = r.p_\perp$, então:

$$p^2 = p_r^2 + p_\perp^2 = p_r^2 + \frac{L^2}{r^2}$$

E a energia total é:

$$E = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

Portanto $L^2 = l(l+1)\hbar^2$, o quadrado do momento angular.

CAPITULO III

FUNÇÕES DE ONDA DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO

As funções de onda que satisfazem a equação de Schroedinger para o átomo de hidrogênio são funções de r , θ , ϕ . A dependência em ϕ da função de onda é $e^{im\phi}$, baseada na função de Legendre. Considerando a dependência radial é da forma de:

$$R_{nl} = e^{-Zr/na_0} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l \mathcal{L}_{nl} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)$$

Onde a_0 é o primeiro raio de Bohr e L_{nl} é um polinomial de Laguerre. Nestas condições as funções de onda para o átomo de hidrogênio é escrita por:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = C_{nlm} R_{nl}(r) f_{l|m|}(\theta) e^{im\phi}$$

Onde R_{nl} e C_{nlm} é uma constante de normalização. Vemos que a função de onda depende dos números quânticos n , l e m , devido as condições de contorno em $R(r)$, $f(\theta)$ e $g(\phi)$. Com a energia depende somente do valor de n . nestas condições para qualquer valor de n , há n valores de l ; e para cada valor de l há $(2l+1)$ possíveis valores de m . exceto para o nível de menor energia, há muitas funções de onda diferentes à mesma energia. Logo, o estado de menor energia, fundamental, tem $n = 1$. Portanto l e m são ambos nulos e o potencial de Laguerre L_{00} e a função de onda é:

$$\psi_{100} = C_{100} e^{-Zr/a_0}$$

Onde C_{100} é determinado por normalização:

$$\int \psi^* \psi d\tau = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi^* \psi r^2 \sin \theta d\phi d\theta dr = 1$$

Com isso, $C_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2}$, considerada a probabilidade de encontrar o eletron no volume d_t é $\psi^* \psi d_t$.

CAPITULO IV

SPIN DO ELÉTRON

Entendemos que quando uma linha espectral do hidrogênio é examinada com alta resolução ela mostra uma estrutura fina. Embora o cálculo relativístico de Sommerfeld de acordo com o modelo de Bohr, concorde com as medidas dessa estrutura fina dessa para o hidrogênio, onde prevê menos linhas do que em outros átomos. A fim de explicar esta estrutura e esclarecer as dificuldades com a explicação quântica da tabela periódica, W. Pauli sugeriu que o elétron tem um quarto número quântico, além de n , l e m .

Nestas condições, os números quânticos surgem das condições de contorno de alguma coordenada, e que para Pauli esperava esta o quarto número quântico para a coordenada temporal numa teoria relativística, mas a idéia não era precedente. Portanto, além da explicação da estrutura fina e da tabela periódica, essa proposta de Sommerfeld devemos rever a ligação entre o momento angular e o momento magnético de um sistema carregado. Se o sistema de partículas estiver rodando, o momento magnético é proporcional a seu momento angular; resultado conhecido Teorema de Larmor. Tendo M , a massa da partícula e carga q , movendo-se num círculo de raio r com velocidade v e frequência $f = v/2\pi r$. O momento angular da partícula é $L = Mvr$. Já o momento magnético de uma corrente circular é dada por:

$$\mu = iA = q \left(\frac{v}{2\pi r} \right) (\pi r^2) = \frac{1}{2} qvr = \frac{1}{2} q \left(\frac{L}{M} \right)$$

Onde a corrente elétrica é dada por:

$$i = qf = \frac{qv}{2\pi r}$$

Porém, se q for positiva, o momento magnético é dado por:

$$\mu = \frac{q}{2M} L$$

Aplicando-se esse resultado para o átomo de hidrogênio, temos para a magnitude e componente z do momento magnético.

$$\mu = \frac{e}{2m_e} L = \frac{e\hbar}{2m_e} \sqrt{l(l+1)} = \sqrt{l(l+1)} \mu_B$$

e $\mu_z = -\frac{e\hbar}{2m_e} m = -m\mu_B$. Para μ_B , magnéton de Bohr.

Portanto, percebemos que a quantização do momento angular implica quantização dos momentos magnéticos. Quando colocada uma barra magnética num campo magnético B, há um torque $\tau = \mu \times B$ que tende a alinhar o magneto com o campo B. Se o magneto estiver girando em torno do seu eixo, o efeito do torque é fazer o eixo do spin em torno da direção do campo externo. Mudando a orientação do magneto sob o ângulo $d\theta$, o trabalho é: $Dw = \tau d\theta = \mu B \sin\theta d\theta = d(-\mu B \cos\theta) = d(-\mu \cdot B)$, a energia potencial, $U = -\mu \cdot B$, e, na direção z, $U = -\mu_z B$.

O efeito usado por Stern e Gerlach, em 1927, para medir as orientações dos momentos magnéticos dos átomos de prata, experiência essa, repetida por Phipps e Taylor, usando átomo de hidrogênio em 1927, considerando o campo

magnético não homogêneo, onde a força sobre um pólo será maior ou menor que sobre o outro, dependendo das orientações. Com isso, havendo força resultante no magneto. Portanto, na experiência de Stern-Gerlach, átomos provenientes de um forno são colimados, passados através de um campo magnético não-homogêneo e detectados numa placa coletora, e é aí que um magneto experimenta uma força resultante que depende da sua orientação. Quando a experiência era realizada com átomos de prata ou de hidrogênio, existem duas linhas. A quantização do momento magnético do elétron em duas orientações no espaço é chamada quantização espacial. Por essa experiência, o resultado apresenta de fato de que s não é um número inteiro como o número orbital l . A exemplo do modelo de Bohr para o átomo, a imagem clássica é útil na direção de resultados de cálculos quânticos. Assim, escrevemos a relação entre a componente z do momento angular J , e a componente z do momento magnético:

$$\mu_z = -g \left(\frac{e\hbar}{2m_e} \right) \frac{J_z}{\hbar}$$

Onde g é chamada de razão giromagnética.

Em consequência das funções de onda do átomo de hidrogênio não é completa porque não é incluído o spin do elétron. As funções de onde o átomo de hidrogênios são caracterizada pelo número quântico spin m_s , que pode ser $+1/2$ ou $-1/2$. Em geral, o estado fundamental do átomo de hidrogênio é uma combinação linear das funções de onda:

$$\psi = C_1\psi_{100+1/2} + C_2\psi_{100-1/2}$$

CAPÍTULO V

ADIÇÃO DE MOMENTO ANGULAR E EFEITO SPIN-ÓRBITA

Consideramos que, de um modo geral, um elétron tem tanto momento angular orbital em l , como momento angular spin pelo número quântico s . Com isso, em conceitos clássicos, o momento angular total $J = L+S$ é de muita importância no sistema quântico, pois o torque resultante é a variação do momento angular total entre $L+S$ e $L-S$. Onde para a mecânica quântica L e S são quantizados, levando a entender que momentos angulares orbital e spin se combinava, de modo a concluir, o valor $\sqrt{j(j+1)} \hbar$, em que $j = l + s$ ou $j = l - s$, $l \neq 0$. Portanto, o momento angular total é o spin, e $j = s$ se $l = 0$.

Através dos conceitos espectroscópicos, o número quântico momento angular total de um estado atômico escrito como índice da expressão que descreve o momento angular orbital. Nestas condições para o hidrogênio, $1S_{1/2}$, o número 1 indica o valor n , para $n=2$ e $l=0$ ou $l=1$. O efeito spin órbita é o estado atômico com os mesmos valores de n e l , mas j diferentes, apresentando energias diferentes em sua interação do spin do elétron relacionado ao seu movimento orbital. Já o desdobramento de estrutura fina é a separação resultante da linha espectral que resulta da transição $2P \rightarrow 1S$ no hidrogênio. Logo, se desejarmos calcular a magnitude do desdobramento de energia do efeito spin-órbita a partir do

modelo de Bohr, começamos por calcular o campo magnético num centro de um círculo resultante do movimento de próton com velocidade v num círculo de raio r , pelo elemento do corrente idl através da lei de Biot-Savart:

$$B = k_m \frac{i dl}{r^2}$$

$k_m = \mu_0/4\pi$. Nestas condições:

$$B = k_m \frac{qv}{r^2}$$

CAPITULO VI

ESTADOS FUNDAMENTAIS DE ÁTOMOS; A TABELA PERIÓDICA

De acordo com as funções de onda e os níveis de energia para átomos mais complicados que o hidrogênio, segundo a equação de Schroedinger, não há revolução devido à interação dos elétrons entre si, a resolução é dada por métodos aproximados. Consideramos os estados exercitados para a energia e as funções de onda de uma única partícula para os chamados estados fundamentais do átomo. Dessa forma, essas funções de onda são simulares aquelas do átomo de hidrogênio e caracterizados pelos números quânticos n , l , m_l e m_s , porém devemos considerar que a energia de um elétron é determinada pelos números quânticos n e l , especificação essa, de m e l , para cada elétron num átomo, denominada configuração eletrônica. Para l , especificamos os valores por letras ou códigos: $spdfgh$, cujas valores são 0, 1, 2, 3, 4, 5; este é o mesmo código que aquele usado para classificar os estados do átomo de hidrogênio. Portanto, o princípio que direciona a configuração eletrônica dos átomos é o Princípio de Exclusão de Pauli, onde, dois elétrons num átomo não pode estar no mesmo estado quântico, isto é, eles não podem ter o mesmo conjunto de valores para os números quânticos n , l , m_l , m_s ,

Elementos químicos mais complicados que o hidrogênio mais destacados são o Hélio ($z = 2$), Lítio ($z = 3$), Berílio ($z = 4$), Boro de Neônio ($z = 5$ a $z = 10$), Sódio de Argônio ($z =$

11 a $z = 18$). Para o hélio, a energia de dois elétrons consiste da energia cinética de cada elétron, uma energia potencial dada por $-Kze^2/r_1$ e uma energia potencial de interação $V_{\text{int}} = + Ke^2/1r^2 - r_1$. Esse processo de energias de interação leva à teoria de perturbação de primeira ordem, tornando o íon de hélio He^+ , formado pela remoção de um elétron, tornando-se idêntico ao átomo de hidrogênio. Surge aí um potencial correspondente, denominado primeiro potencial de ionização do átomo. Para os outros elementos citados a análise e estudo são feitos a partir dos conceitos atômicos vigentes ao processo de configuração dos seus elétrons.

CAPITULO VII

ESTADOS EXCITADOS E ESPECTROS DOS ÁTOMOS ALCALINOS

Para entender o aspecto atômico é necessário compreender os estados excitados dos átomos. Considerando um átomo de muitos elétrons, o estudo é mais complicado para o hidrogênio. Um estado excitado de um átomo envolve uma mudança de estado de qualquer um elétron ou mais elétrons. Porém, mesmo no caso de menor complicação, a mudança no estado do elétron pode causar uma mudança de energia dos outros. No entanto, há casos onde o efeito é desprezível e os níveis de energia podem ser calculados de maneira simples de um elétron mais um núcleo estável. Modelo esse, que funciona bem para os átomos alcalinos: Li, Na, K, Rb e Cs; apresentando espectros ópticos similares ao do hidrogênio. A diferença entre a excitação de um elétron do núcleo e a excitação de um elétron mais externo é o que simplifica o processo.

Considerando o sódio que tem um núcleo de neônio e um elétron 3s mais externo, a energia de ionização seria a mesma que a do elétron $n = 3$ no hidrogênio Na: $K_5 = 2, L_5 = 2, L_P = 6$ e $M_S = 1$. Portanto, o espectro óptico do sódio deve ser devido as transições envolvendo somente o elétron mais externo. Transição essa que envolve o núcleo de elétrons produzindo linhas espectrais na região do raio X do espectro eletromagnético. E os níveis de energia espectros de outros átomos alcalinos são semelhantes àqueles para o sódio; o

nível de energia para o átomo de potássio consiste de um nível de energia interno mais um nível de energia externo.

CAPITULO VIII

ESTADOS EXCITADOS E ESPECTROS DE ÁTOMOS DE DOIS ELÉTRONS

Neste caso dos estados excitados e espectros de átomos de dois elétrons, fazemos uma pequena análise em que os níveis de energia e espectros ópticos são mais complicados para átomos com mais de um elétron na camada externa; destacando os níveis de energia para o hélio e os alcalinos terrosos, que são átomos citados na segunda coluna da tabela periódica, em que apresentam um cerne de elétrons mais dois elétrons na camada s mais externa. Nestas condições, a maioria dos espectros correspondem à subida de um desses elétrons para uma camada ou subcamada de maior energia, considerados níveis normais. Havendo excitação dos elétrons externos, os níveis de energia são chamados de anômolos.

Com isso, por causa do efeito spin-órbita, os três estados de energia, $j = l + 1$, $j = l$ ou $j = l - 1$, são de energias diferentes, em que há desdobramento de estrutura fina. Portanto, os estados $s = 1$ são chamados estados tripleto. E a transição, do estado tripleto $3s\ 3p$ para o estado do fundamental, que não obedece a essa regra de seleção é chamada linha de intercombinação. Pois consideramos a causa de diferença de energia um efeito quântico particular para os requisitos de simetria da função de onda total das partículas idênticas.

A parte espacial da função de onda deve ser anti-simétrica no estado tripleto e simétrica no estado singleto, levando a função da onda total a ser anti-simétrica. No estado espacial anti-simétrico, as partículas tendem a ficar mais afastadas que no estado espacial simétrico.

Contudo, a energia de interação em função da repulsão eletrostática é positiva e varia inversamente com a distância de separação, tornando-se maior quando os elétrons estão juntos no estado singleto espacialmente simétrico $S=0$ do que os elétrons estão afastados no estado tripleto espacialmente anti-simétrico. Portanto, a diferença de energia é da ordem de $1/V$, muito maior que a separação de estrutura fina; verdadeiro para quase todos os átomos de dois elétrons, como He, Be, Mg e Ca, exceto para o mercúrio, pesado para o estado tripleto.

CAPITULO IX

O EFEITO ZEEMAN

Como já sabemos, o estudo de separação das linhas espectrais foi elaborado, pela primeira vez por Zeeman, que tenha uma contribuição de Faraday quando um átomo é colocado num campo magnético externo. Esse efeito que leva o nome de Efeito Zeeman onde mostra que, mesmo sem qualquer conhecimento da estrutura interna do átomo pode-se a magnitude da variação de frequência em função do campo magnético numa carga oscilante. Nestas condições, o resultado é deduzido por: $\Delta m =$

$\pm \frac{1}{2} (e/m)B$ ou $\Delta m = 0$ onde e é a carga, m é a massa da carga e B o valor do campo externo.

Para linha sespectrais, há três componentes criados pelo campo magnético: uma de frequência maior, uma de frequência menor e um ainalterada, permitindo ciência para o estudo as razão carga-massa do elétron. Para isso, desdobramento de uma linha espectral nestas três componentes no campo magnético é chamado Efeito Zeeman Normal, e o desdobramento mais comum em mais de três componentes é chamado Efeito Zeeman Anômalo. No entando, essa terminologia não bem adequada hoje, pois, com o conceito de spineletrônico, ambos os efeitos são bem entendidos.

Para conceitos clássicos, o Efeito Zeeman Anômalo é estudado qualitativamente. Então, considerando uma carga pontual q , oscilando ao longo doeixo x , onde na física

clássica relacionamos a frequência dessa oscilação com a irradiação da carga. Em seus movimentos, horário ou anti-horário, temos o raio R onde:

$$v = R\omega \quad \text{e} \quad \frac{mv^2}{R} = mR\omega^2 = F$$

a força vem do campo magnético, pode ser relacionado por $qvB = qRm\omega^2$. Considerando as variações, temos:

$$\Delta F = \Delta(mR\omega^2) \approx 2mR\omega \Delta\omega$$

usando: $\Delta F = qvB = qR\omega B$

temos $\Delta\omega = \frac{1}{2} \frac{q}{m} B$ ou $qR\omega B = 2mR\omega \Delta\omega$

Sendo o campo magnético paralelo ao plano de órbita, ou seja, paralelo à linha original de oscilação, não haverá deslocamento e persistirá a frequência original de oscilação, onde na partícula oscilante as diferenças de comprimento de onda permite

uma determinação da razão q/m . Com isso, na mecânica quântica, o deslocamento no nível de energia determinado por um deslocamento na frequência e no comprimento de onda de uma linha espectral.

Nestas condições, o Efeito Zeeman Normal ocorre para linhas espectrais como resultados de uma transição entre estados singleto. Essa partícula, quando colocada num campo magnético externo, sua energia atômica muda em função da energia do seu

momento magnético no campo dado por

$$\Delta E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\mu_z B$$

em uma direção definida de z por B,
$$\Delta E = +m_l \frac{e\hbar}{2m_e} B$$

Portanto, por causa da separação uniforme dos níveis, há três energias de transição diferentes: $E_0 + e\hbar B / 2m_e$

$$E_0 \quad \text{e} \quad E_0 - e\hbar B / 2m_e$$

que corresponde a transição com $\Delta m_l = +1$, $\Delta m_l = 0$ e $\Delta m_l = -1$. As mudanças de frequências são expressas em concordância com o cálculo clássico. Em contrapartida, o Efeito Zeeman Anômalo ocorre quando o spin dos estados inicial ou finais, ou ambos, não for zero. O cálculo da separação do nível de energia é dado pelo momento magnético resultante do spin, sendo 1 e, de $1/2$ magnéton de Bohr, e consequentemente, o momento magnético total não é paralelo ao momento angular total.

Assim $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, onde o momento magnético total é:

$$\boldsymbol{\mu} = -g_l \mu_B \frac{\mathbf{L}}{\hbar} - g_s \mu_B \frac{\mathbf{S}}{\hbar}$$

Com $g_l = 1$ e $g_s = 2$

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S})$$

CONCLUSÃO

Podemos perceber que a equação de Schrödinger em três dimensões é resolvida para o átomo de hidrogênio separando-as em três equações diferenciais ordinárias, uma para as coordenadas r , θ e ϕ . Os números quânticos n , l e m aparecem da aplicação das condições de contorno nas coordenadas r , θ e ϕ para as soluções destas equações. A função de onda para o estado fundamental do átomo de hidrogênio é máxima na origem. A densidade de probabilidade radial para este estado fundamental é atribuída aos estudos de Bohr. Além do momento angular orbital, um elétron tem um momento angular intrínseco spin. Os vetores momento angular orbital e spin podem combinar-se para dar o momento angular total caracterizado pelo número quântico J . Há uma ligeira diferença de energia associada a esses possíveis valores de J devido à interação dos momentos angulares spin e orbital chamado efeito spin-órbita. Isso leva à estrutura duplete dos níveis de energia em átomos de um elétron e à estrutura tripleto em átomos de dois elétrons, chamada estrutura fina. A tabela periódica dos elementos é construída, partindo-se do hidrogênio e adicionando-se um elétron ao átomo precedente no estado quântico de menor energia consistente com o princípio de exclusão. Devido a maior penetração da função de onda do elétron mais externo na blindagem eletrônica mais interna da carga nuclear, os elétrons mais externos com baixo momento angular têm energias menores que aqueles na mesma mesma camada

com momento angular maior. Os níveis de energia de átomos alcalinos, com um elétron fora do cerne de camada fechada, são similares àquele do átomo de hidrogênio exceto que a degenerescência l é removida por causa da penetração do elétron mais externo do cerne elétrons. Os níveis de energia dos átomos com dois elétrons do lado de fora do cerne da camada fechada podem ser separados em estados singleto e estados tripleto. Em virtude de a separação média dos elétrons ser maior quando eles estão em estado tripleto, a energia de interação média é menor, de forma que os níveis de energia tripleto têm uma energia menor do que os correspondentes aos níveis do estado singleto. Estados excitados normais são devidos à excitação de somente um dos elétrons mais externos. Os níveis de energia de um átomo no estado de momento angular total j separam-se em $2j + 1$ componentes no campo magnético devido à interação do campo e ao momento magnético. No efeito Zeeman normal, que ocorre quando o spin do estado original é zero, a separação é independente de j e l , e as regras de seleção levam a somente três linhas espectrais diferentes. No efeito Zeeman anômalo, o que ocorre quando o spin de um outro estado não é nulo, a separação depende de j e l de uma maneira complicada, e são vistas mais de três linhas espectrais.

REFERÊNCIAS

H.G. Kuhn, *Atomic Spectra*, New York: Academic Press, Inc., 1962.

L. Pauling and S. Goudsmit, *The Structure of Line Spectra*, New York: McGraw-Hill Book Company, 1930.

H. White, *Introduction to Atomic Spectra*, New York: McGraw-Hill Book Company, 1934.

G. Herzberg, *Atomic Spectra and Atomic Structure*, New York: Dover Publications, Inc., 1944.

L. Pauling and E. B. Wilson, *Introduction to Quantum Mechanics*, New York: McGraw-Hill Book Company, 1935.



EDITORA EDFIKA

E-mail: editoraedfika@gmail.com

(82) 9 9376-2377 e (82) 9 9190-9105