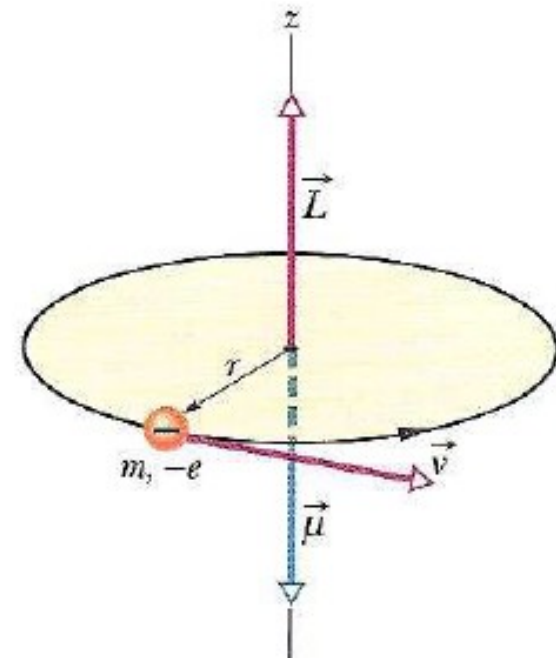


## Aula 16 – Átomos.

### Os Átomos Possuem Momento Angular e Magnetismo

A figura a seguir mostra uma partícula negativamente carregada descrevendo uma órbita circular. Uma partícula em órbita possui um momento angular  $\vec{L}$  e (como o movimento da partícula equivale a uma corrente elétrica) um momento magnético  $\vec{\mu}$ . Como se pode ver, os vetores  $\vec{L}$  e  $\vec{\mu}$  são perpendiculares ao plano da órbita e, como a carga é negativa, têm sentidos opostos.

Modelo clássico de uma partícula de massa  $m$  e carga  $-e$  que se move com velocidade  $v$  em uma órbita circular de raio  $r$ . A partícula tem um momento angular  $\vec{L}$  dado por  $\vec{r} \times \vec{p}$ , onde  $\vec{p}$  é o momento linear da partícula,  $m\vec{v}$ . O movimento da partícula equivale a uma espira percorrida por corrente e produz um momento magnético  $\vec{\mu}$  no sentido oposto ao de  $\vec{L}$ .



# Aula 16 – Átomos.

## O Princípio de Exclusão de Pauli

No Capítulo 39 discutimos vários tipos de armadilhas para elétrons, desde armadilhas fictícias unidimensionais até a armadilha tridimensional natural que é o átomo de hidrogênio. Em todos esses exemplos havia apenas um elétron no interior da armadilha. Ao discutir armadilhas que contêm dois ou mais elétrons (como vamos fazer nas próximas duas seções) devemos levar em conta um princípio que se aplica a todas as partículas cujo número quântico de spin,  $s$ , não é zero ou um número inteiro. Esse princípio se aplica não só aos elétrons mas também aos prótons e aos nêutrons, já que  $s = 1/2$  para as três partículas. O princípio é conhecido como **princípio de exclusão de Pauli**, em homenagem a Wolfgang Pauli, que o formulou em 1925. No caso de elétrons ele pode ser enunciado da seguinte forma:

Dois elétrons confinados na mesma armadilha não podem ter o mesmo conjunto de números quânticos.

# O Spin do Elétron

A existência do spin do elétron foi postulada empiricamente por dois estudantes de doutorado holandeses, George Uhlenbeck e Samuel Goudsmit, para explicar alguns espectros atômicos. A teoria quântica do spin foi formulada alguns anos mais tarde pelo físico inglês P. A. M. Dirac, que desenvolveu (em 1929) uma teoria quântica relativística do elétron.

Uma interpretação clássica do spin seria imaginá-lo como um movimento de rotação do elétron em torno do próprio eixo; entretanto, esse modelo clássico, como o modelo clássico das órbitas, não está de acordo com os resultados experimentais.

## Estados Quânticos do Elétron em um Átomo

Número Quântico	Símbolo	Valores Permitidos	Relacionado a
Principal	$n$	1, 2, 3, ...	Distância do núcleo
Orbital	$\ell$	0, 1, 2, ..., $(n - 1)$	Momento angular orbital
Magnético orbital	$m_\ell$	0, $\pm 1$ , $\pm 2$ , ..., $\pm \ell$	Momento angular orbital (componente $z$ )
De spin	$s$	$\frac{1}{2}$	Momento angular de spin
Magnético de spin	$m_s$	$\pm \frac{1}{2}$	Momento angular de spin (componente $z$ )

# Aula 16 – Átomos.

## Construção da Tabela Periódica

Os quatro números quânticos  $n$ ,  $\ell$ ,  $m_\ell$  e  $m_s$  identificam os estados quânticos dos elétrons em um átomo com mais de um elétron. Para um dado valor de  $\ell$  existem  $2\ell + 1$  valores possíveis do número quântico magnético  $m_\ell$ , e para cada conjunto dos outros números quânticos existem dois valores possíveis do número quântico de spin  $m_s$ . Assim, existem  $2(2\ell + 1)$  estados em cada subcamada. Acontece que *todos os estados de uma subcamada têm a mesma energia*, já que o valor da energia depende apenas dos valores de  $n$  e  $\ell$ .

Na classificação das subcamadas os valores de  $\ell$  são representados por letras:

$$\ell = 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad \dots$$

### Neônio

O átomo de neônio tem 10 elétrons. Apenas dois desses elétrons podem ser acomodados na primeira subcamada, a subcamada  $1s$ . Os dois elétrons têm  $n = 1$ ,  $\ell = 0$  e  $m_\ell = 0$ , mas um tem  $m_s = 1/2$  e o outro  $m_s = -1/2$ . A subcamada  $1s$  tem  $2[2(0) + 1] = 2$  estados. Como no neônio essa subcamada contém todos os elétrons permitidos pelo princípio de exclusão de Pauli, dizemos que está **completa**.

Dois dos oito elétrons restantes ocupam a subcamada seguinte, a subcamada  $2s$ . Os outros seis elétrons completam a camada  $2p$ , que, com  $\ell = 1$ , comporta  $2[2(1) + 1] = 6$  estados.

**Configuração eletrônica do estado fundamental  $1s^2 2s^2 2p^6$**

## Aula 16 – Átomos.

# Construção da Tabela Periódica

### *Sódio*

O sódio, com 11 elétrons, vem logo depois do neônio na tabela periódica. Dez desses elétrons formam uma nuvem esférica semelhante à do neônio, que, como vimos, tem momento angular zero. O elétron restante está sozinho na subcamada 3s. Como esse **elétron de valência** se encontra em um estado com  $\ell = 0$  (ou seja, um estado *s*), o momento angular e o momento magnético do átomo de sódio são iguais ao spin e ao momento magnético intrínseco desse elétron, respectivamente.

O sódio tende a se combinar com átomos que possuem uma “lacuna” na última camada de elétrons. O sódio, juntamente com os outros **metais alcalinos**, forma a coluna da esquerda da tabela periódica, composta por metais quimicamente ativos.

**Configuração eletrônica do estado fundamental  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$**

## Aula 16 – Átomos.

# Construção da Tabela Periódica

### Cloro

O átomo de cloro, com 17 elétrons, possui uma nuvem esférica de 10 elétrons semelhante à do neônio, e mais 7 elétrons. Dois desses elétrons completam a subcamada 3s e os outros cinco vão para a subcamada 3p. Como essa subcamada, com  $\ell = 1$ , pode acomodar  $2[2(1) + 1] = 6$  elétrons, existe uma “lacuna” não preenchida por elétrons.

O cloro tende a se combinar com átomos, como o de sódio, que possuem um elétron na última camada. O cloreto de sódio (NaCl), por exemplo, é um composto muito estável. O cloro, juntamente com os outros **halogênios**, forma a coluna VIIA da tabela periódica, composta por não-metais quimicamente ativos.

**Configuração eletrônica do estado fundamental [Ne] 3s<sup>2</sup> 3p<sup>5</sup>**

# Aula 16 – Átomos.

Atividade extra classe. Entrega até próxima sexta feira

1 – Descreva, de maneira clara e detalhada, como se pode medir a energia de ionização dos átomos. Forneça resultados numéricos como exemplo.

2 – Descreva o experimento de Stern-Gerlach, e em particular explique:

a- Qual era o resultado esperado?

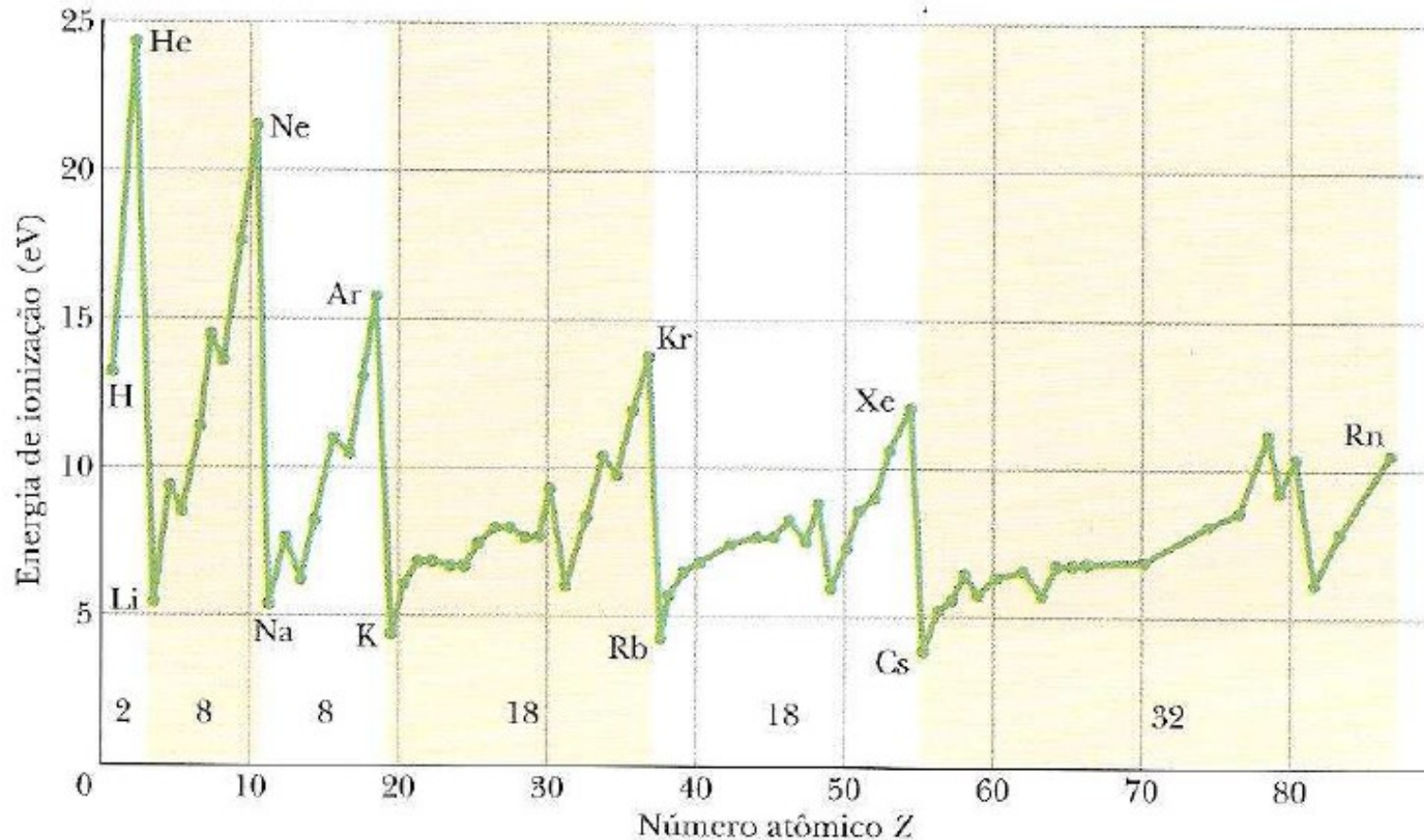
b- Porque a força de coulomb não influenciou o resultado?

c- Porque a força de lorentz não influenciou o resultado?

d- porque o número quântico associado ao spin tem valor  $\frac{1}{2}$  e não outro?

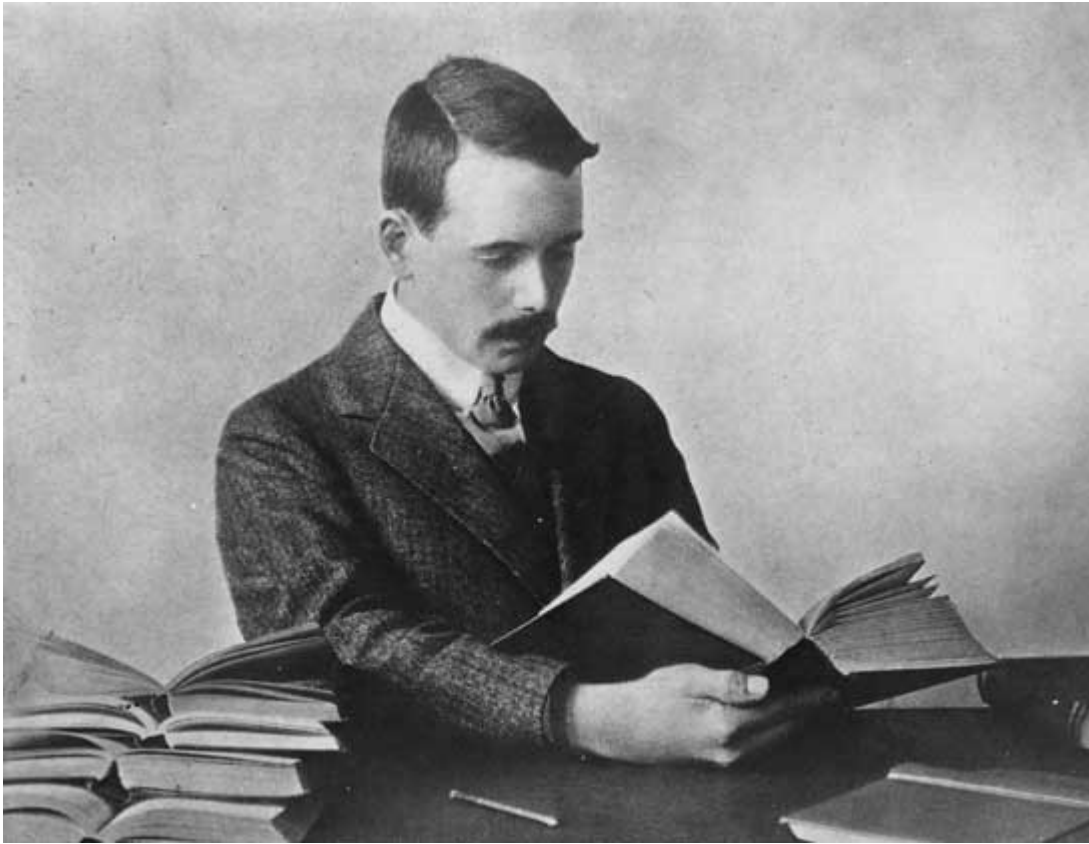
## Aula 16 – Átomos.

A figura seg. mostra um exemplo de uma propriedade dos elementos que depende de sua posição na tabela periódica (Apêndice G). A figura é um gráfico da **energia de ionização** dos elementos (a energia necessária para remover de um átomo neutro o elétron mais fracamente ligado) em função do número atômico do elemento a que o átomo pertence. As notáveis semelhanças das propriedades químicas e físicas





## Aula 16– Átomos.



Henry Gwyn Jeffreys Moseley  
(Weymouth, 23 de novembro de 1887 —  
Galípoli, 10 de agosto de 1915) foi um  
físico britânico nascido na Inglaterra.

Foi assistente de Rutherford.  
Descobriu, em 1913, uma relação  
entre o espectro de raios X de um  
elemento químico e seu número  
atômico.

Foi o primeiro a conseguir  
determinar os números atômicos  
dos elementos com precisão.

Mostrou que, quando os átomos  
eram bombardeados pelos raios  
catódicos, eles emitiam raios X, e,  
que elemento bombardeado tinha  
um espectro de emissão que  
revelava os valores dos números  
atômicos correspondentes, e ainda  
previu lugares na tabela periódica  
para outros elementos, que foram  
descobertos anos mais tarde.

# Aula 16 – Átomos.

Um pouco mais sobre a biografia de Moseley.

Ele corrigiu o posicionamento dos elementos químicos na tabela periódica a partir de seu posicionamento em termos de um parâmetro mais adequado, o **número atômico  $Z$** , posicionamento este que persiste até hoje. Cientistas posteriores foram determinando os números de prótons de outros elementos a partir desta técnica.

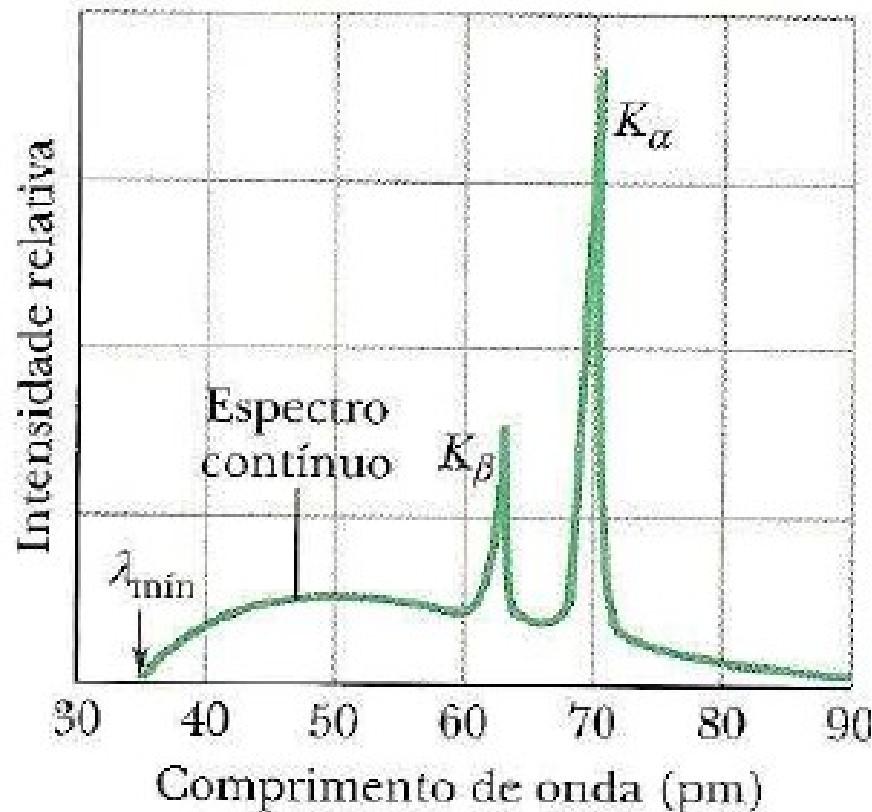
Ainda em 1913 enunciou a lei de Moseley, que estabelece a relação entre a frequência de um raio röntgen, emitido por um átomo, e os níveis de energia entre os quais um elétron salta. Moseley planejou continuar sua pesquisa sobre física em Oxford, assim renunciou a Manchester. Mas seus planos não seguiram em frente, pois, quando a Primeira Guerra Mundial estourou, ele decidiu se alistar no exército britânico. Morreu em combate em 1915, durante a Campanha de Galípoli, na Turquia.

Graças aos seus estudos a tabela periódica adquiriu sua forma definitiva. Algumas pessoas especularam que Moseley poderia ter sido laureado com o Nobel de Física de 1916, caso não houvesse morrido servindo o exército britânico.

## Aula 16 – Átomos.

### Os Espectros de Raios X dos Elementos

Quando um alvo sólido, como uma placa de cobre ou tungstênio, é bombardeado com elétrons cuja energia cinética é da ordem de quiloelétrons-volts são emitidas ondas eletromagnéticas conhecidas como **raios X**.



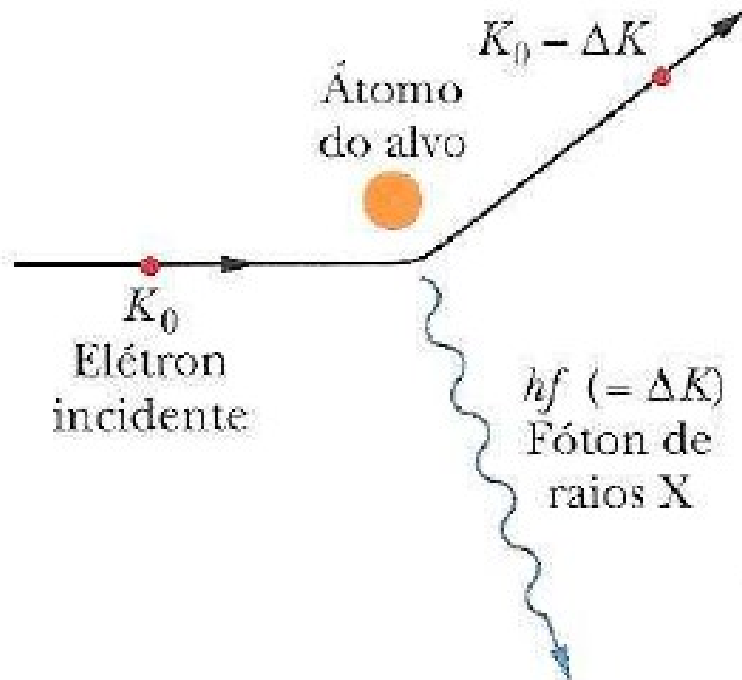
Na figura ao lado é mostrado o espectro de Raios X, ou seja, a intensidade em função dos comprimentos de onda produzidos quando elétrons de 35 keV incidem em um alvo de molibdênio em função do comprimento de onda. O espectro contínuo e os picos são produzidos por mecanismos diferentes.

## Aula 16 – Átomos.

### O Espectro Contínuo de Raios X

Esta parte do espectro está ligada à colisão do elétron incidente com os átomos do alvo conforme ilustrado na figura abaixo.

O espectro contínuo exibe um comprimento de onda mínimo, ou comprimento de onda de corte,  $\lambda_{\min}$ , que acontece quando a colisão se processa de tal modo que o elétron incidente perde toda a sua energia  $K_0$ .



$$K_0 = hf = \frac{hc}{\lambda_{\min}},$$

$$\lambda_{\min} = \frac{hc}{K_0} \quad (\text{comprimento de onda de corte}).$$

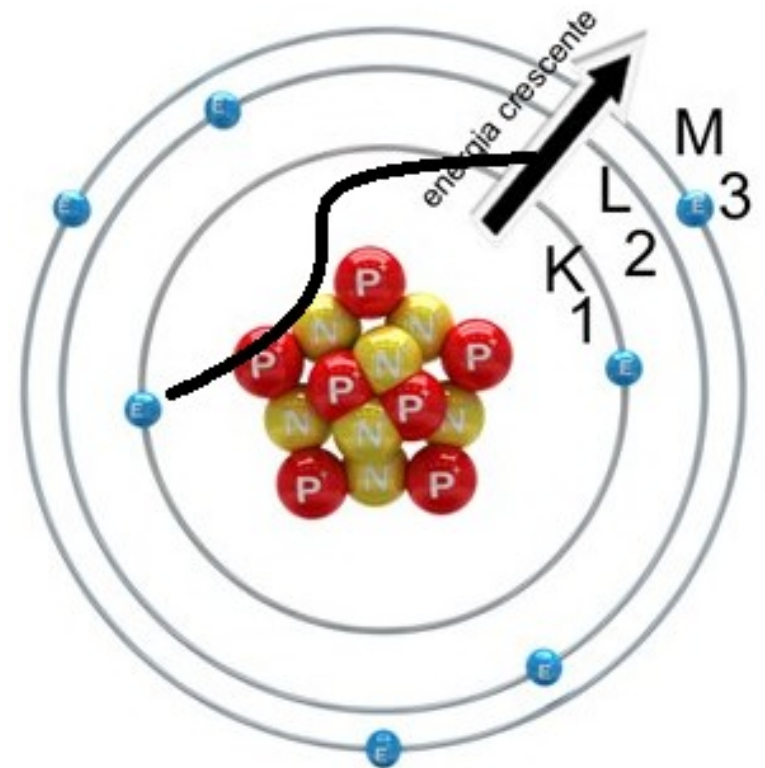
## Aula 16 – Átomos.

# O Espectro Característico de Raios X

Os picos surgem em um processo que envolve duas etapas:

(1) Ao se chocar com o átomo do alvo, o elétron incidente arranca um elétron de uma das camadas mais internas do átomo. Se esse elétron for da camada K ( $n=1$ ), o resultado é o aparecimento de uma lacuna que posteriormente será preenchida.

Elétron da camada interna ejetado

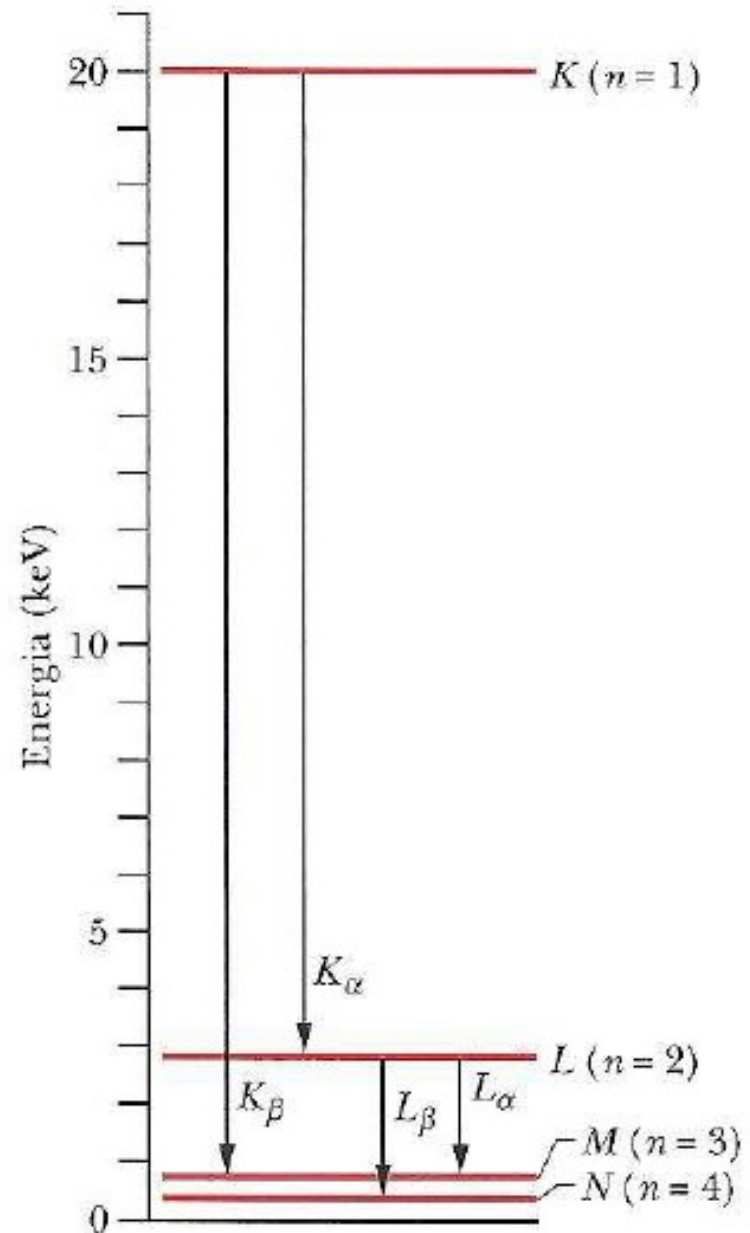


# Aula 16 – Átomos.

## O Espectro Característico de Raios

(2) Um elétron proveniente de camadas com maior energia salta, preenchendo a lacuna deixada. Se o elétron preenchedor vier da camada com  $n=2$ , haverá emissão de um fóton com energia igual a diferença de energia entre estes níveis. Tal radiação corresponde ao denominado como  $K_\alpha$ . . transição ocorrer de camadas com  $n=3,4,5 \dots$ , denominamos  $K_\beta$ ,  $K_\gamma$ ,  $K_\delta \dots$  respectivamente.

Se o buraco preenchido for o da camada L ( $n=2$ ), adotamos o mesmo procedimento:  $L_\alpha$ ,  $L_\beta$ ,  $L_\gamma$ ,  $L_\delta$



## Aula 16 – Átomos.

A derivação de uma relação analítica entre a frequência correspondente a linha  $K\alpha$  para vários elementos e o correspondente número atômico foi feita usando o modelo de Bohr do núcleo atômico de Rutherford

Considere um núcleo de um **átomo hidrogenoide** com carga nuclear igual a  $(Z-1)$ . Tal carga é devido a existência de  $Z$  prótons menos uma blindagem do outro elétron  $1s$ .

A energia segundo o modelo semi-clássico de Bohr (Bohr-Rutherford) é dada por:

$$E_n = -\frac{me^4 (Z-1)^2}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} = -\frac{13,60 (Z-1)^2 \text{ eV}}{n^2}, \text{ para } n = 1, 2, 3, \dots$$

Considerando transições  $K_\alpha$  [de  $n=2$  para camada  $K$  ( $n=1$ )] teremos:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{-(13,60 \text{ eV})(Z-1)^2}{2^2} - \frac{-(13,60 \text{ eV})(Z-1)^2}{1^2}$$
$$\Delta E = (10,2 \text{ eV})(Z-1)^2.$$

## Aula 16 – Átomos.

### O Gráfico de Moseley

Nesse caso, a frequência  $f$  da linha  $K_\alpha$  é

$$f = \frac{\Delta E}{h} = \frac{(10,2 \text{ eV})(Z - 1)^2}{(4,14 \times 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s})} = (2,46 \times 10^{15} \text{ Hz})(Z - 1)^2.$$

Tomando a raiz quadrada de ambos os membros, obtemos:

$$\sqrt{f} = CZ - C,$$

onde  $C$  é uma constante ( $= 4,96 \times 10^7 \text{ Hz}^{1/2}$ ).

O que se ajusta perfeitamente ao gráfico obtido por Moseley da raiz quadrada da frequência associada a radiação  $K_\alpha$  em função do número atômico  $Z$ .



## Aula 16 – Átomos.

### O Gráfico de Moseley

Nesse caso, a frequência  $f$  da linha  $K_\alpha$  é

$$f = \frac{\Delta E}{h} = \frac{(10,2 \text{ eV})(Z - 1)^2}{(4,14 \times 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s})} = (2,46 \times 10^{15} \text{ Hz})(Z - 1)^2.$$

Tomando a raiz quadrada de ambos os membros, obtemos:

$$\sqrt{f} = CZ - C,$$

onde  $C$  é uma constante ( $= 4,96 \times 10^7 \text{ Hz}^{1/2}$ ).

O que se ajusta perfeitamente ao gráfico obtido por Moseley da raiz quadrada da frequência associada a radiação  $K_\alpha$  em função do número atômico  $Z$ .

# O Gráfico de Moseley

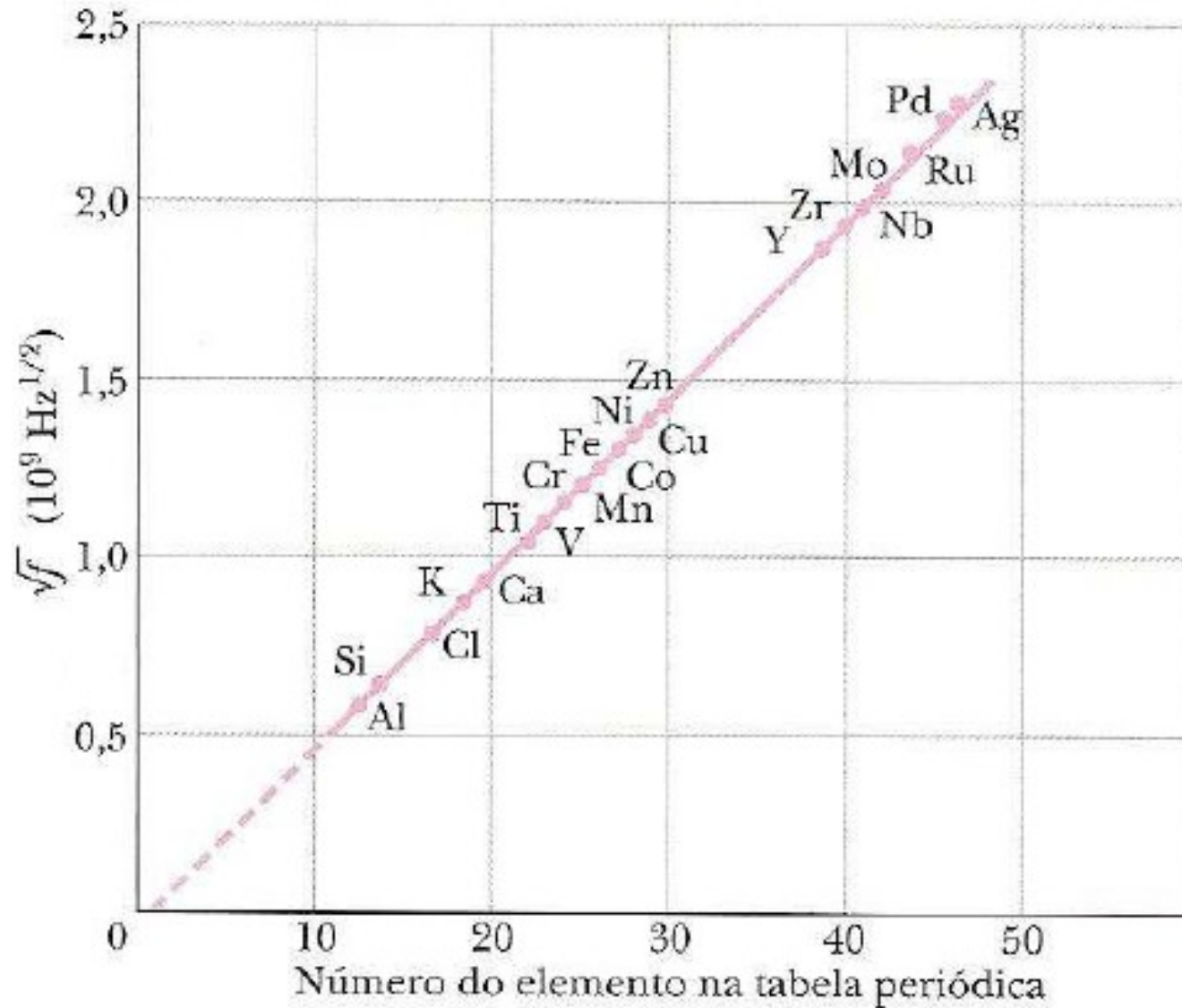


Gráfico da emissão  $K_\alpha$  para 21 elementos químicos observados em 1913 pelo físico inglês H. G. J. Moseley

## Exercícios - fixação

Lista tirada do do Livro “Fundamentos de Física (Halliday) – vol. 4 , 8° Ed.”

Questões : (todas) 12, 13 e 15

**12** Um elétron, confinado em um poço de potencial finito como o da Fig. 39-7, se encontra no estado de menor energia possível. (a) Seu comprimento de onda de de Broglie, (b) seu módulo do momento e (c) sua energia seriam maiores, menores ou iguais se o poço de potencial fosse infinito,

$$E_f < E_i \quad (p^2/2m)$$

$$p_f < p_i \quad (h/\lambda)$$

$$\lambda_f > \lambda_i$$

**13** Um elétron que está confinado em um poço de potencial infinito unidimensional de largura  $L$  é excitado do estado fundamental para o primeiro estado excitado. Essa excitação aumenta, diminui ou não tem nenhum efeito sobre a probabilidade de detectar o elétron em uma pequena região (a) no centro do poço; (b) perto de uma das bordas do poço?

- a) No centro diminui
- b) nas bordas aumenta

**15** Um átomo de hidrogênio se encontra no terceiro estado excitado. Para que estado (especifique o número quântico  $n$ ) o átomo teria que passar (a) para emitir um fóton com o maior comprimento de onda possível; (b) para emitir um fóton com o menor comprimento de onda possível; (c) para absorver um fóton com o maior comprimento de onda possível?

a)  $n=3$

b)  $n=1$

c)  $n=5$

Problemas: 1-3 -5 – 6 -7-9–10-11-13-14- 15-35-37-38-40-45-51

•1 A energia do estado fundamental de um elétron confinado em um poço de potencial infinito unidimensional é 2,6 eV. Qual será a energia do estado fundamental se a largura do poço for multiplicada por dois?

$$2,6/4 = 0,65 \text{ eV}$$

•5 Considere o núcleo atômico como equivalente a um poço de potencial infinito unidimensional de largura  $L = 1,4 \times 10^{-14}$  m, um diâmetro nuclear típico. Qual seria a energia do estado fundamental de um elétron confinado a um núcleo atômico?

•6 Determine a energia do estado fundamental (a) de um elétron e (b) de um próton confinado em um poço de potencial infinito unidimensional com 200 pm de largura.

•7 Um elétron no estado fundamental de um poço de potencial unidimensional infinito de largura  $L$  tem uma energia  $E_1$ . Quando a largura do poço muda para  $L'$ , a energia do elétron diminui para  $E'_1 = 0,500E_1$ . Qual é o valor da razão  $L'/L$ ?

••9 Um elétron está confinado em um poço de potencial infinito unidimensional. Determine o valor (a) do número quântico maior e (b) do número quântico menor tais que a diferença de energia correspondente seja igual à energia do nível  $n = 5$ . (c) Mostre que não existe um par de níveis adjacentes tais que a diferença de energia entre os níveis seja igual à energia do nível  $n = 6$ .

••10 Um elétron está confinado em um poço de potencial infinito unidimensional de 250 pm de largura e se encontra no estado fundamental. Determine (a) o maior, (b) o segundo maior e (c) o terceiro maior comprimento de onda que podem ser absorvidos pelo elétron de uma só vez.

••11 Um elétron confinado em um poço de potencial infinito unidimensional com 250 pm de largura é transferido do primeiro estado excitado para o terceiro estado excitado. (a) Que energia deve ser fornecida ao elétron para que execute esse salto quântico? Se o elétron em seguida decai para o estado fundamental emitindo fótons, o que pode ocorrer de várias formas, determine (b) o menor comprimento de onda, (c) o segundo menor, (d) o maior e (e) o segundo maior comprimento de onda que podem ser emitidos. (f) Mostre as várias formas possíveis de decaimento em um diagrama de níveis de energia. Se um fóton com um comprimento de onda de 29,4 nm é emitido, determine (g) o maior comprimento de onda e (h) o menor comprimento de onda que podem ser emitidos em seguida.

••13 Um elétron está confinado em um poço de potencial infinito unidimensional com 100 pm de largura; o elétron se encontra no estado fundamental. Qual é a probabilidade de que o elétron seja detectado em uma região de largura  $\Delta x = 5,0$  pm em torno do ponto (a)  $x = 25$  pm; (b)  $x = 50$  pm; (c)  $x = 90$  pm? (*Sugestão:* A largura  $\Delta x$  da região é tão pequena que a densidade de probabilidade pode ser considerada constante em seu interior.)

••14 Uma partícula é confinada em um poço de potencial infinito unidimensional como o da Fig. 39-2. Se a partícula se encontra no estado fundamental, qual é a probabilidade de que seja detectada (a) entre  $x = 0$  e  $x = 0,25L$ ; (b) entre  $x = 0,75L$  e  $x = L$ ; (c) entre  $x = 0,25L$  e  $x = 0,75L$ ?

••15 Um poço unidimensional infinito de 200 pm de largura contém um elétron no terceiro estado excitado. Um detector de elétrons com 2,00 pm de largura é instalado com o centro em um ponto de máxima densidade de probabilidade. (a) Qual é a probabilidade de que o elétron seja detectado? (b) A cada 1000 vezes que realizarmos essa experiência, quantas vezes, em média, o elétron será detectado?

- 35 Quais são (a) a energia, (b) o módulo do momento e (c) o comprimento de onda do fóton emitido quando um átomo de hidrogênio sofre uma transição de um estado com  $n = 3$  para um estado com  $n = 1$ ?
- 37 Qual é a razão entre o menor comprimento de onda da série de Balmer e o menor comprimento de onda da série de Lyman?
- 38 Um átomo (que não é um átomo de hidrogênio) absorve um fóton com um comprimento de onda de 375 nm e emite um fóton com um comprimento de onda de 580 nm. Qual é a energia absorvida pelo átomo no processo?
- 40 Um átomo de hidrogênio é excitado do estado fundamental para o estado com  $n = 4$ . (a) Qual é a energia absorvida pelo átomo? Considere as energias dos fótons que podem ser emitidos pelo átomo ao decair para o estado fundamental de várias formas possíveis. (b) Quantas energias diferentes são possíveis? Dessas energias, determine (c) a maior; (d) a segunda maior; (e) a terceira maior; (f) a menor; (g) a segunda menor; (h) a terceira menor.

**••41** Qual é a probabilidade de que, no estado fundamental do átomo de hidrogênio, o elétron seja encontrado a uma distância do núcleo maior que o raio de Bohr? (*Sugestão:* Veja o Exemplo 39-8.)

**••45** No estado fundamental do átomo de hidrogênio, o elétron possui uma energia total de  $-13,6$  eV. Quais são (a) a energia cinética; (b) a energia potencial do elétron a uma distância do núcleo igual ao raio de Bohr?

**••51** Qual é a probabilidade de que um elétron no estado fundamental do átomo de hidrogênio seja encontrado na região entre duas cascas esféricas de raios  $r$  e  $r + \Delta r$  (a) se  $r = 0,500a$  e  $\Delta r = 0,010a$ ; (b) se  $r = 1,00a$  e  $\Delta r = 0,01a$ , onde  $a$  é o raio de Bohr? (*Sugestão:*  $\Delta r$  é suficientemente pequeno para que a densidade de probabilidade radial seja considerada constante entre  $r$  e  $r + \Delta r$ .)