

Física Geral I • FIS0703

Aula 26

21/12/2016

O átomo de hidrogénio em mecânica quântica

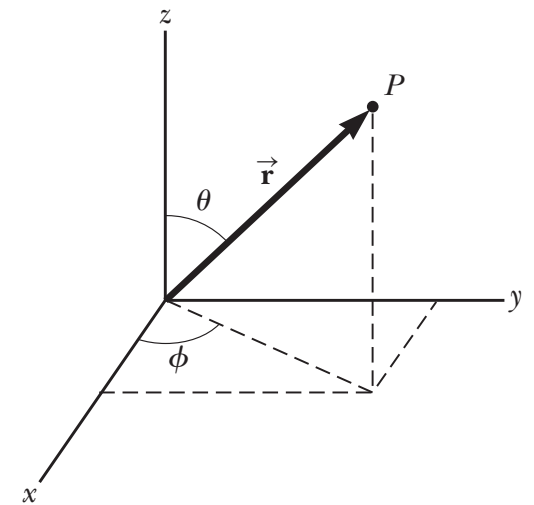
Em **mecânica quântica**, os estados estacionários do átomo de hidrogénio são encontrados através da resolução da **equação de Schrödinger independente do tempo**.

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

Energia potencial do eletrão $U(r) = -k_e \frac{e^2}{r}$

É mais fácil resolver a equação em coordenadas esféricas (r, θ, ϕ)

Coordenadas esféricas



Devido às condições fronteira, a equação tem soluções apenas quando certos **números quânticos** assumem certos valores inteiros.

$\psi_{n\ell m_\ell}(r, \theta, \phi)$

$$E_n = -\frac{k_e e^2}{2a_0} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

As energias são iguais às do modelo de Bohr!

Com as soluções $\psi_{n\ell m_\ell}(r, \theta, \phi)$ podemos calcular as probabilidades de encontrar o eletrão em certas regiões do espaço.

O átomo de hidrogénio em mecânica quântica

Cada combinação permitida dos números quânticos corresponde a um **estado estacionário** do átomo.

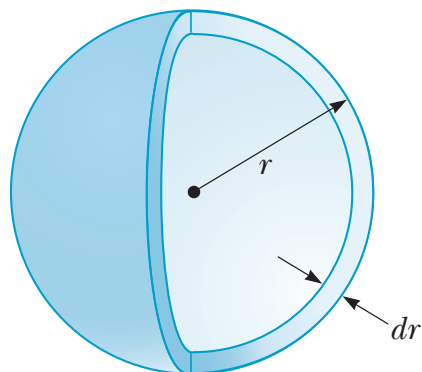
Número quântico	Nome	Valores possíveis	Número de valores possíveis
n	Número quântico principal	1,2,3,...	sem limite
ℓ	Número quântico orbital	0,1,2,...,n-1	n
m_ℓ	Número quântico magnético	$-\ell, -\ell+1, \dots, 0, \dots, \ell-1, \ell$	$2\ell+1$

- ▶ Todos os estados com o mesmo número quântico principal n formam uma **camada**
- ▶ Todos os estados com os mesmos números quânticos n e ℓ formam uma **subcamada**

n	Símbolo da camada
1	K
2	L
3	M
4	N
5	O
6	P

ℓ	Símbolo da subcamada
0	s
1	p
2	d
3	f
4	g
5	h

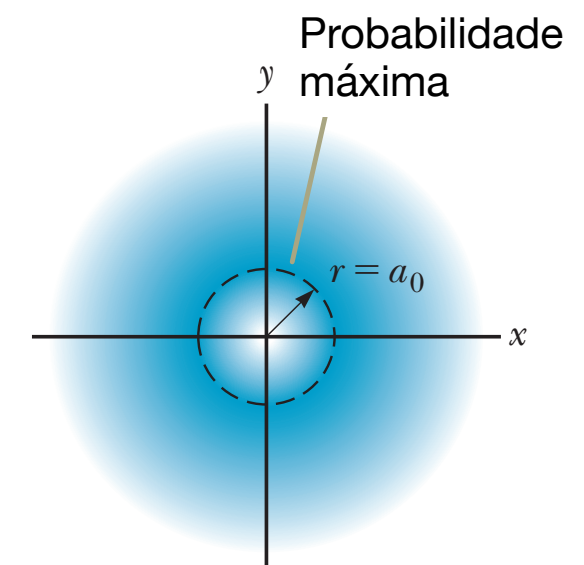
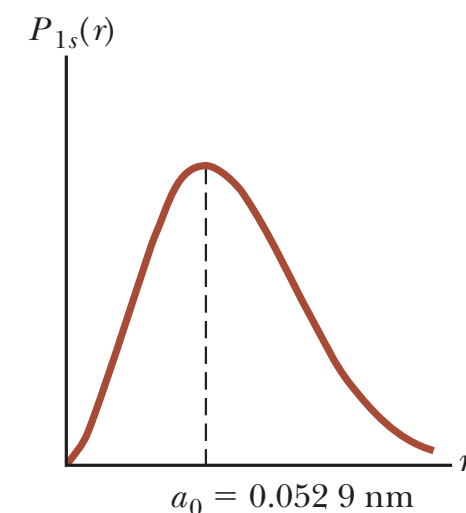
O estado fundamental: $\psi_{1s}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$



Qual é a probabilidade de encontrar o elétron à distância r do núcleo?

$$P(r)dr = |\psi|^2 dV = |\psi|^2 4\pi r^2 dr$$

Densidade radial de probabilidade



Funções de onda do átomo de hidrogénio

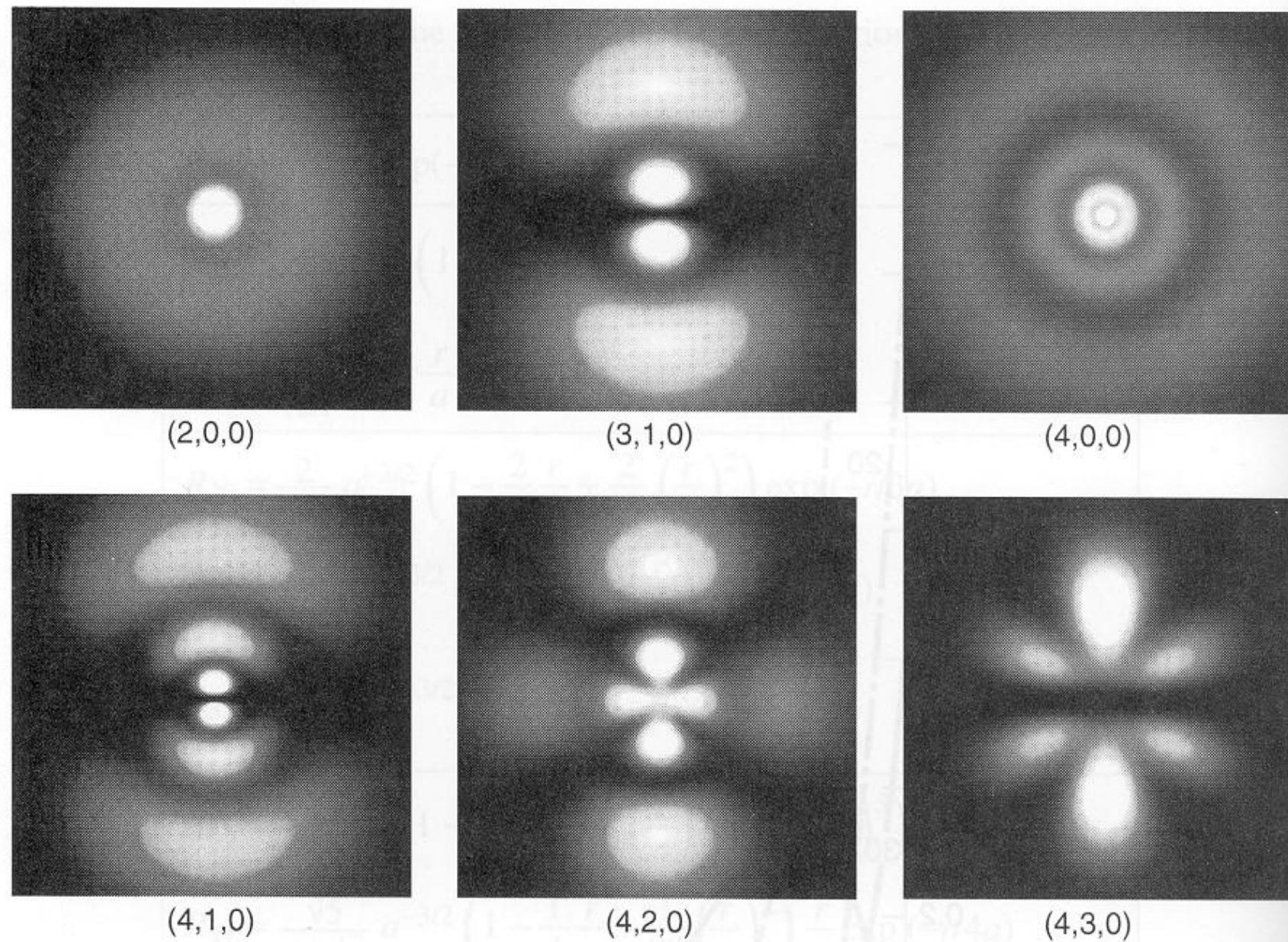


FIGURE 4.5: Density plots for the hydrogen wave functions (n, l, m) . Imagine each plot to be rotated about the (vertical) z axis. Printed by permission using “Atom in a Box,” v1.0.8, by Dauger Research. You can make your own plots by going to the Web site <http://dauger.com>.

Funções de onda do átomo de hidrogénio

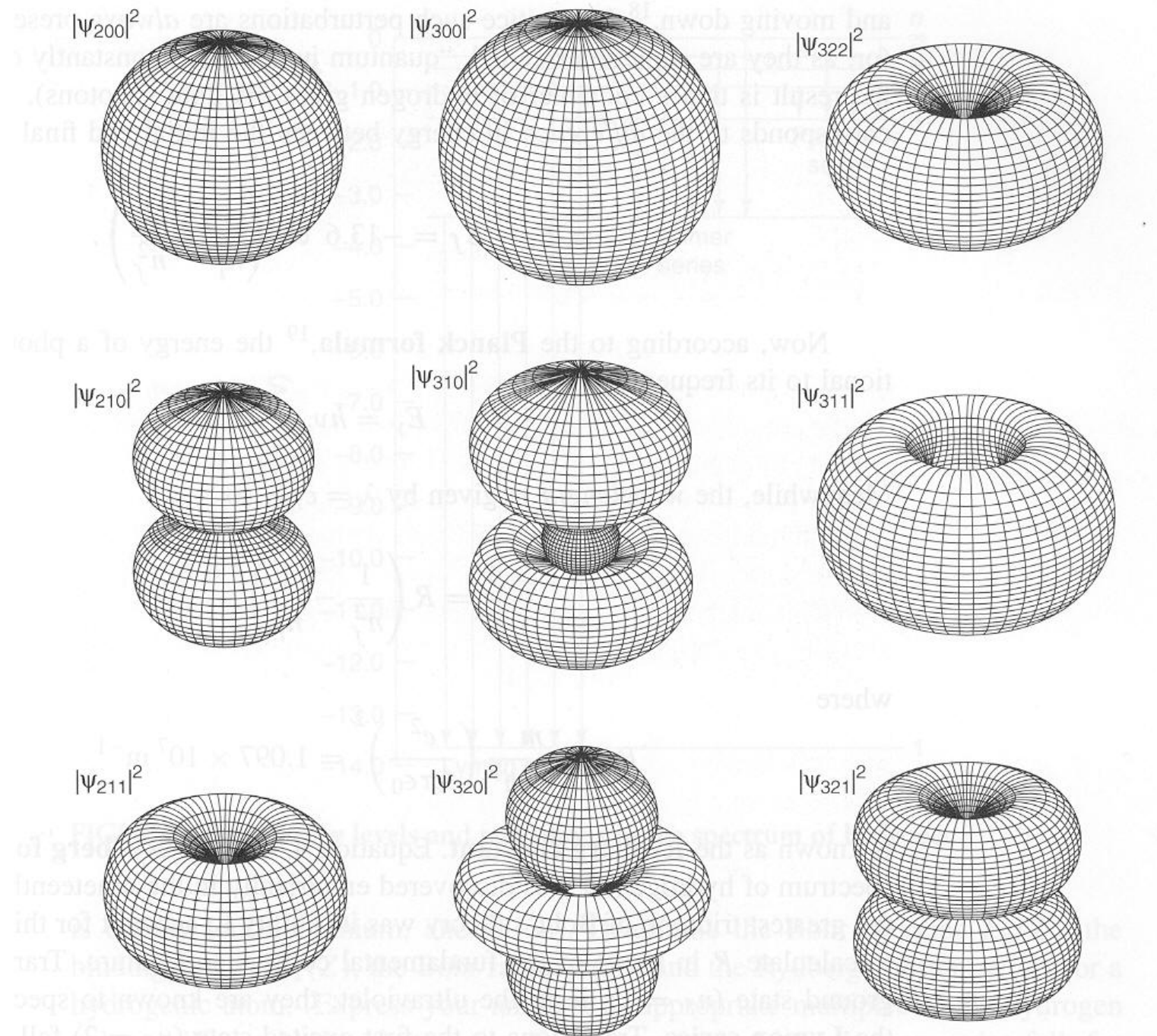


FIGURE 4.6: Surfaces of constant $|\psi|^2$ for the first few hydrogen wave functions. Reprinted by permission from Siegmund Brandt and Hans Dieter Dahmen, *The Picture Book of Quantum Mechanics*, 3rd ed., Springer, New York (2001).

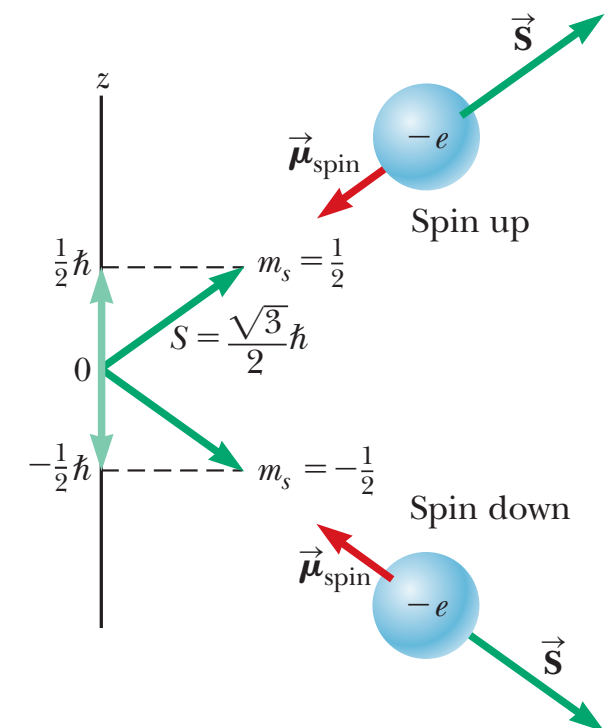
O spin do elétron

- ▶ Cada estado do átomo de hidrogénio descrito pelos números quânticos n , ℓ , m_ℓ de facto consiste em **dois estados**.
- ▶ O elétron tem um **momento angular intrínseco**, chamado o **spin**.
- ▶ Pelas regras da mecânica quântica do momento angular, a **projeção do spin** ao longo duma direção do espaço pode assumir apenas certos valores quantizadas.
- ▶ O spin introduz **um número quântico adicional**, m_s .

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

Com isso:

n	ℓ	m_ℓ	m_s	Subcamada	Número de estados da subcamada
1	0	0	+1/2	1s	2
1	0	0	-1/2	1s	
2	0	0	+1/2	2s	2
2	0	0	-1/2	2s	
2	1	1	+1/2	2p	6
2	1	1	-1/2	2p	
2	1	0	+1/2	2p	
2	1	0	-1/2	2p	
2	1	-1	+1/2	2p	
2	1	-1	-1/2	2p	



























Os estados das duas primeiras camadas

O princípio de exclusão

- * Embora **outros átomos** têm uma **estrutura mais complicada** do que o hidrogénio, os seus estados quânticos também podem ser descritos pelos números quânticos n , ℓ , m_ℓ , m_s para cada eletrão.
- * A pergunta é: quantos eletrões podem estar no mesmo estado quântico?

Wolfgang Pauli (1925):
O princípio de exclusão

Dois eletrões não podem estar no mesmo estado quântico; por isso, dois eletrões no mesmo átomo não podem ter o mesmo conjunto de números quânticos.

Atom	1s	2s	2p	Electronic configuration
Li				$1s^2 2s^1$
Be				$1s^2 2s^2$
B				$1s^2 2s^2 2p^1$
C				$1s^2 2s^2 2p^2$
N				$1s^2 2s^2 2p^3$
O				$1s^2 2s^2 2p^4$
F				$1s^2 2s^2 2p^5$
Ne				$1s^2 2s^2 2p^6$

Um **orbital** = um conjunto (n, ℓ, m_ℓ)

- Com isso podemos construir a estrutura eletrónica dos átomos através do **preenchimento sucessivo de orbitais**, cuja energia é cada vez maior, com eletrões.
- Quando uma subcamada está cheia, o próximo eletrão vai para a próxima subcamada vazia com menor energia.
- Quando orbitais têm **a mesma energia**, eles são preenchidos conforma à **regra de Hund**:

o número de spins não emparelhados deve ser o máximo possível.

A tabela periódica dos elementos

- **Dimitri Mendeleev** (1871) tinha organizado os elementos conforme as suas massas atómicas e propriedades químicas.
- **Propriedades químicas** são parecidas quando a **estrutura eletrónica** é parecida.

Group I	Group II	Transition elements										Group III	Group IV	Group V	Group VI	Group VII	Group 0
H 1 $1s^1$																H 1 $1s^1$	He 2 $1s^2$
Li 3 $2s^1$	Be 4 $2s^2$											B 5 $2p^1$	C 6 $2p^2$	N 7 $2p^3$	O 8 $2p^4$	F 9 $2p^5$	Ne 10 $2p^6$
Na 11 $3s^1$	Mg 12 $3s^2$											Al 13 $3p^1$	Si 14 $3p^2$	P 15 $3p^3$	S 16 $3p^4$	Cl 17 $3p^5$	Ar 18 $3p^6$
K 19 $4s^1$	Ca 20 $4s^2$	Sc 21 $3d^1 4s^2$	Ti 22 $3d^2 4s^2$	V 23 $3d^3 4s^2$	Cr 24 $3d^5 4s^1$	Mn 25 $3d^5 4s^2$	Fe 26 $3d^6 4s^2$	Co 27 $3d^7 4s^2$	Ni 28 $3d^8 4s^2$	Cu 29 $3d^{10} 4s^1$	Zn 30 $3d^{10} 4s^2$	Ga 31 $4p^1$	Ge 32 $4p^2$	As 33 $4p^3$	Se 34 $4p^4$	Br 35 $4p^5$	Kr 36 $4p^6$
Rb 37 $5s^1$	Sr 38 $5s^2$	Y 39 $4d^1 5s^2$	Zr 40 $4d^2 5s^2$	Nb 41 $4d^4 5s^1$	Mo 42 $4d^5 5s^1$	Tc 43 $4d^5 5s^2$	Ru 44 $4d^7 5s^1$	Rh 45 $4d^8 5s^1$	Pd 46 $4d^{10}$	Ag 47 $4d^{10} 5s^1$	Cd 48 $4d^{10} 5s^2$	In 49 $5p^1$	Sn 50 $5p^2$	Sb 51 $5p^3$	Te 52 $5p^4$	I 53 $5p^5$	Xe 54 $5p^6$
Cs 55 $6s^1$	Ba 56 $6s^2$	57-71*	Hf 72 $5d^2 6s^2$	Ta 73 $5d^3 6s^2$	W 74 $5d^4 6s^2$	Re 75 $5d^5 6s^2$	Os 76 $5d^6 6s^2$	Ir 77 $5d^7 6s^2$	Pt 78 $5d^9 6s^1$	Au 79 $5d^{10} 6s^1$	Hg 80 $5d^{10} 6s^2$	Tl 81 $6p^1$	Pb 82 $6p^2$	Bi 83 $6p^3$	Po 84 $6p^4$	At 85 $6p^5$	Rn 86 $6p^6$
Fr 87 $7s^1$	Ra 88 $7s^2$	89-103**	Rf 104 $6d^2 7s^2$	Db 105 $6d^3 7s^2$	Sg 106 $6d^4 7s^2$	Bh 107 $6d^5 7s^2$	Hs 108 $6d^6 7s^2$	Mt 109 $6d^7 7s^2$	Ds 110 $6d^9 7s^1$	Rg 111	112		114		116		

*Lanthanide series

**Actinide series

La 57 $5d^1 6s^2$	Ce 58 $5d^1 4f^1 6s^2$	Pr 59 $4f^3 6s^2$	Nd 60 $4f^4 6s^2$	Pm 61 $4f^5 6s^2$	Sm 62 $4f^6 6s^2$	Eu 63 $4f^7 6s^2$	Gd 64 $5d^1 4f^7 6s^2$	Tb 65 $5d^1 4f^8 6s^2$	Dy 66 $4f^{10} 6s^2$	Ho 67 $4f^{11} 6s^2$	Er 68 $4f^{12} 6s^2$	Tm 69 $4f^{13} 6s^2$	Yb 70 $4f^{14} 6s^2$	Lu 71 $5d^1 4f^{14} 6s^2$
Ac 89 $6d^1 7s^2$	Th 90 $6d^2 7s^2$	Pa 91 $5f^2 6d^1 7s^2$	U 92 $5f^3 6d^1 7s^2$	Np 93 $5f^4 6d^1 7s^2$	Pu 94 $5f^6 7s^2$	Am 95 $5f^7 7s^2$	Cm 96 $5f^7 6d^1 7s^2$	Bk 97 $5f^8 6d^1 7s^2$	Cf 98 $5f^{10} 7s^2$	Es 99 $5f^{11} 7s^2$	Fm 100 $5f^{12} 7s^2$	Md 101 $5f^{13} 7s^2$	No 102 $5f^{14} 7s^2$	Lr 103 $5f^{14} 6d^1 7s^2$

Núcleos

Propriedades dos núcleos: massa e carga

Com a descoberta do núcleo atómico por Rutherford foi também encontrado que quase toda a massa do átomo está concentrada no núcleo.

- ▶ O núcleo do átomo de hidrogénio é o **protão**, com massa $m_{\text{protão}} \approx 1836 m_{\text{elétron}}$.
- ▶ O **elétron** é tem carga $-e$, o protão tem carga $+e$. Assim a carga total do átomo é 0.

Um átomo com Z eletrões tem Z protões no núcleo

Z ... número de carga

Mas as massas dos núcleos mais leves **não** são $Z \times m_{\text{protão}}$, mas sim aproximadamente $A \times m_{\text{protão}}$, com $A \approx 2Z$.

A ... número de massa

Rutherford propôs que o núcleo contém também $N=A-Z$ partículas neutras, os **neutrões**, com $m_{\text{neutrão}} \approx m_{\text{protão}}$

N ... número de neutrões

Os neutrões foram descobertas por **James Chadwick** em 1932.

Os protões e neutrões são designados de **nucleões**.

- ▶ Um elemento químico é determinado pelo número de protões Z .
- ▶ Isótopos: núcleos com o mesmo Z mas diferentes números de neutrões N .

Notação: ${}^A_Z X$
Nome do elemento \uparrow

Por exemplo:

${}^1_1 H$

hidrogénio

${}^2_1 H$

deutério

${}^3_1 H$

trítio

Propriedades dos núcleos: massa e carga

Como unidade de massa usa-se frequentemente a **unidade da massa atómica, u**

$$1 \text{ u} \equiv \frac{1}{12} m({}^{12}_6\text{C}) = 1.660539 \times 10^{-27} \text{ kg} = 931.494 \text{ MeV}/c^2$$

$$E_R = mc^2 \longrightarrow m = \overset{\uparrow}{E_R}/c^2$$

Exemplos:

Particle	kg	Mass u	MeV/c ²
Proton	$1.672\,62 \times 10^{-27}$	1.007 276	938.27
Neutron	$1.674\,93 \times 10^{-27}$	1.008 665	939.57
Electron	$9.109\,38 \times 10^{-31}$	$5.485\,79 \times 10^{-4}$	0.510 999
${}^1_1\text{H}$ atom	$1.673\,53 \times 10^{-27}$	1.007 825	938.783
${}^4_2\text{He}$ nucleus	$6.644\,66 \times 10^{-27}$	4.001 506	3 727.38
${}^{12}_6\text{C}$ atom	$1.992\,65 \times 10^{-27}$	12.000 000	11 177.9

- Como é possível que 6 protões + 6 neutrões produzem carbono-12 com massa 12u quando cada protão e neutrão já tem uma massa maior que 1u?

As massas dos protões e neutrões da tabela são as massas das partículas **livres**. Quando estão **ligadas uns aos outros** dentro dum núcleo, parte da massa total é convertida em **energia de ligação**.

Propriedades dos núcleos: tamanho e estrutura

Das experiências de Rutherford obteve-se a estimativa que a carga do núcleo é concentrada numa esfera com **raio de aproximadamente 10^{-14} m**.

Uma **unidade conveniente** para tamanhos tão pequenos: $1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$ 1 femtômetro
(ou “1 fermi”, em homenagem a **Enrico Fermi**)

Muitas experiências desde então mostraram que a maioria dos núcleos são **aproximadamente esféricos**, com raios de

$$r = aA^{1/3} \quad \text{com} \quad a = 1.2 \times 10^{-15} \text{ m}$$

Estimativas:

$$m_p \approx m_n \approx m$$

Massa do núcleo ${}^Z_A X$: $M({}^Z_A X) \approx Am$

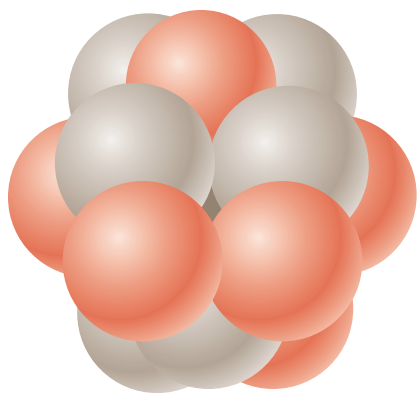
Volume:

$$V = \frac{4\pi}{3} r^3 = \frac{4\pi}{3} a^3 A$$

Densidade:

$$\rho = \frac{M({}^Z_A X)}{V} = \frac{Am}{\frac{4\pi a^3 A}{3}} = \frac{3m}{4\pi a^3}$$

→ A densidade é **igual** para todos os núcleos: $\rho = \frac{3(1.67 \times 10^{-27} \text{ kg})}{4\pi(1.2 \times 10^{-15} \text{ m}^3)} = 2.3 \times 10^{17} \text{ kg/m}^3$



Densidade constante → o núcleo comporta-se como um **empacotamento compacto** de esferas, ou como um **líquido incompressível**.

Se a Terra tivesse esta densidade, teria um raio de 180 m!

A estabilidade dos núcleos

Os **prótons** num núcleo tão compacto **repelem-se** fortemente (cargas iguais).

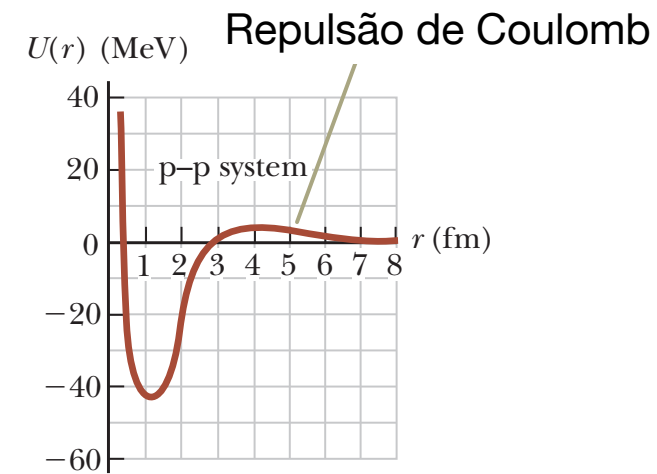
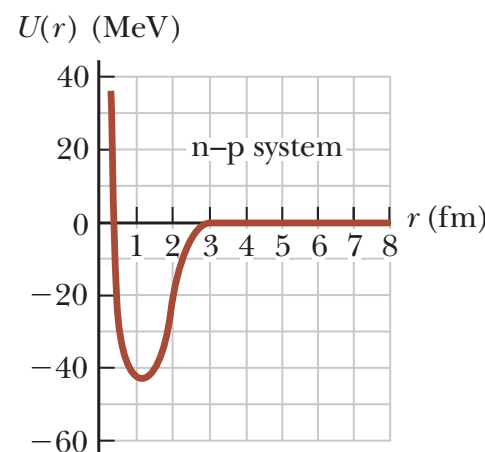
Porque é que os núcleos não se desintegram imediatamente?

Os núcleos ficam estáveis porque atua uma **outra força** atrativa ainda mais forte.

A força nuclear forte:

- ▶ Tem um alcance muito curto, $\sim 1\text{-}2\text{ fm}$
- ▶ Atua entre os nucleões, com uma intensidade independente da carga ($n\text{-}n \approx n\text{-}p \approx p\text{-}p$)

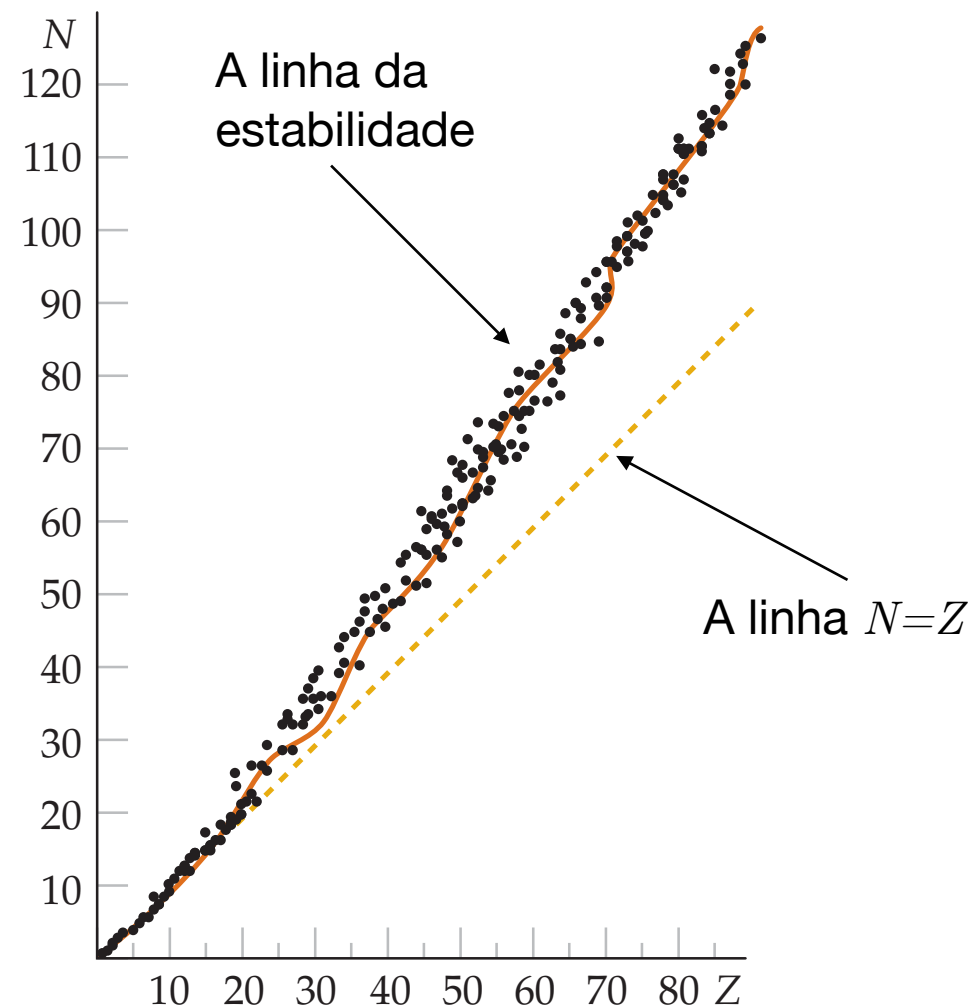
Esboço da energia potencial
da força nuclear forte



- ▶ A força torna-se repulsiva a pequenas distâncias \rightarrow explicação da incompressibilidade dos núcleos
- ▶ Elétrões não sentem a força nuclear forte

A estabilidade dos núcleos

- ▶ Existem aproximadamente **270 núcleos estáveis**.
- ▶ São conhecidas mais umas **centenas de núcleos instáveis**.



Quando há muitos pares p-p, a repulsão de Coulomb torna o núcleo menos estável



Para núcleos mais pesados
 $N > Z$

- ▶ Muitos físicos acreditam na possibilidade duma “**ilha de estabilidade**” com novos elementos super-pesados. Isto é tópico de investigação atual.

A energia de ligação nuclear

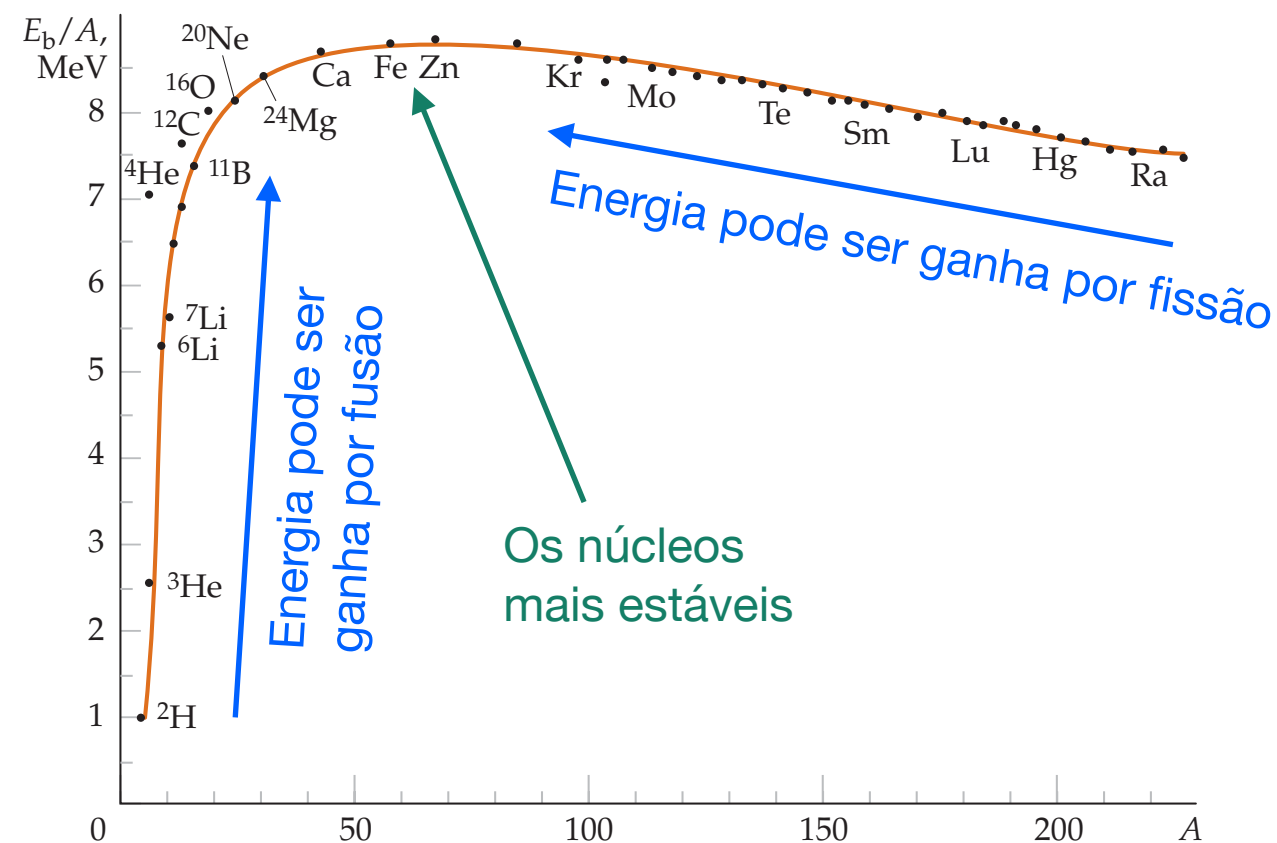
* A energia de ligação E_b = energia de repouso dos nucleões — energia de repouso do núcleo

É a energia que tem de ser fornecida para separar um núcleo nos seus constituintes.

$$E_b = [ZM(H) + Nm_n - M({}_Z^AX)] c^2$$

Massa atómica do hidrogénio Massa do neutrão Massa atómica do isótopo ${}_Z^AX$

* A energia de ligação por nucleão é uma medida da estabilidade



A radioatividade

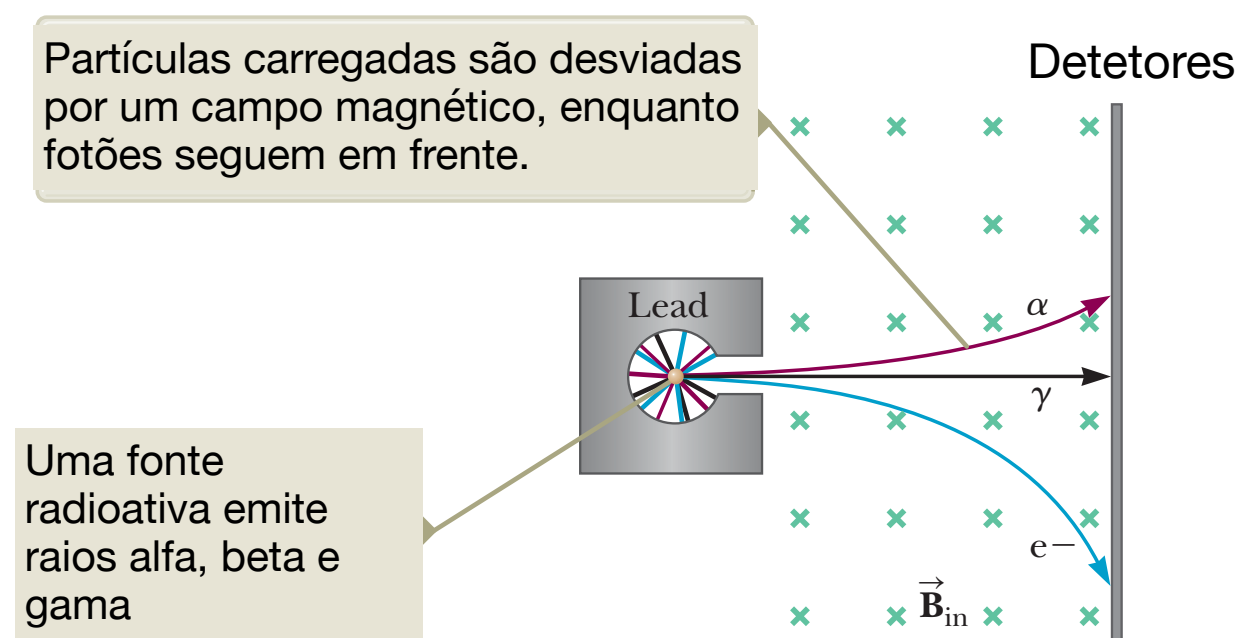
Em 1896, **Henri Becquerel** descobriu acidentalmente que cristais que continham urânio espontaneamente emitem um novo tipo de radiação invisível que escurece uma chapa fotográfica.

Este processo de emissão espontânea de radiação obteve a designação **radioatividade**.

A evidência obtida em muitas experiências mostrou que a radioatividade é o **resultado do decaimento, ou da desintegração, de núcleos instáveis**.

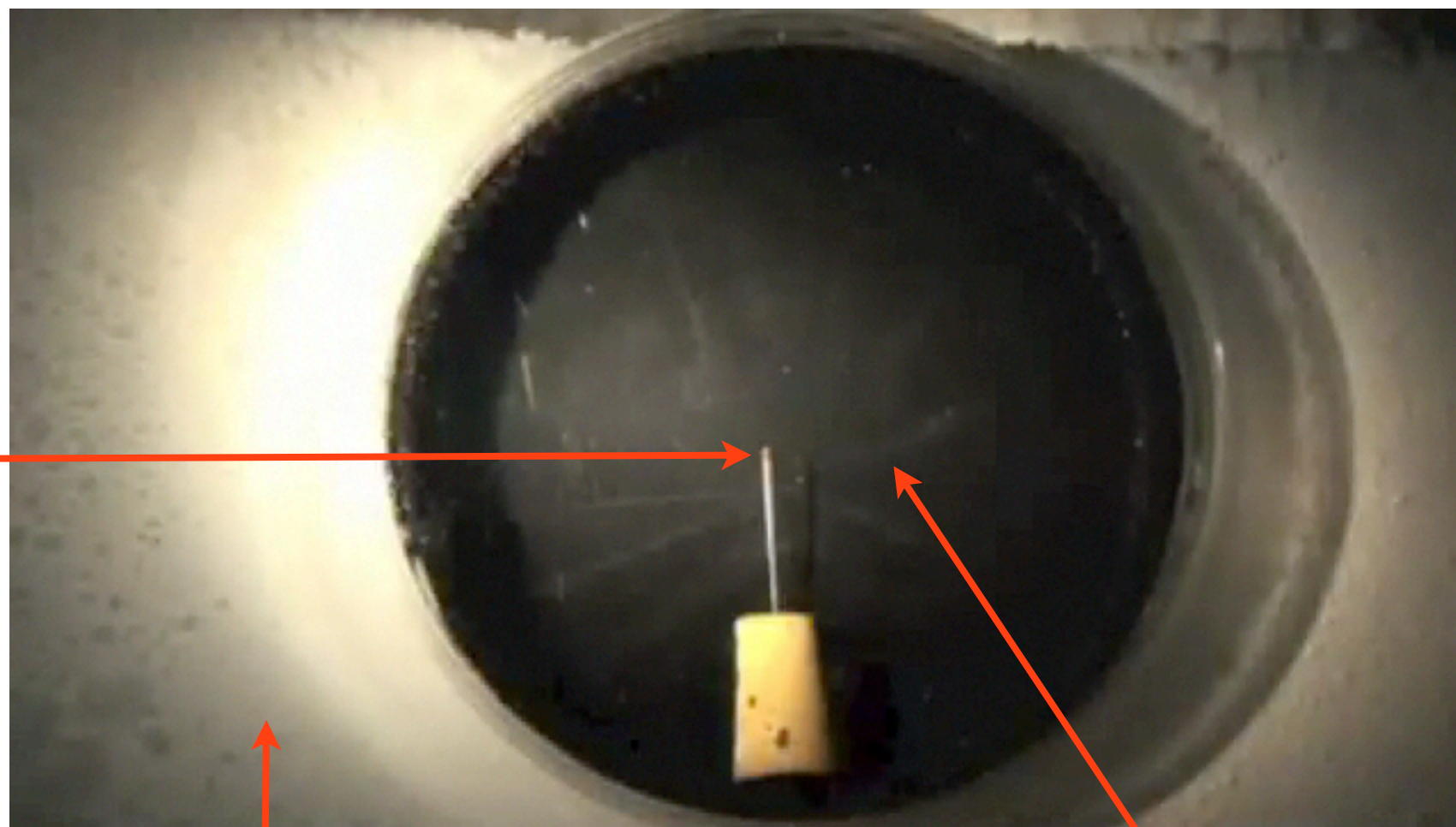
Existem três tipos principais de radioatividade

- ▶ **Dcaimento α** : núcleos de ^4He são emitidos
- ▶ **Dcaimento β** : elétrons ou positrões (anti-elétrons) são emitidos
- ▶ **Dcaimento γ** : fótons de alta energia são emitidos



A câmara de nuvens

Decaimento α de ^{210}Pb



Fonte radioativa

Gelo seco (CO_2 sólido)

Vapor de álcool isopropílico

A lei do decaimento radioativo

- ▶ Não é possível prever quando **um determinado núcleo** instável vai decair.
- ▶ Mas sabendo a probabilidade do decaimento por unidade do tempo podemos fazer previsões estatísticas sobre **uma amostra com um grande número de núcleos** instáveis.

$N(t)$... o número de núcleos instáveis no instante t na amostra

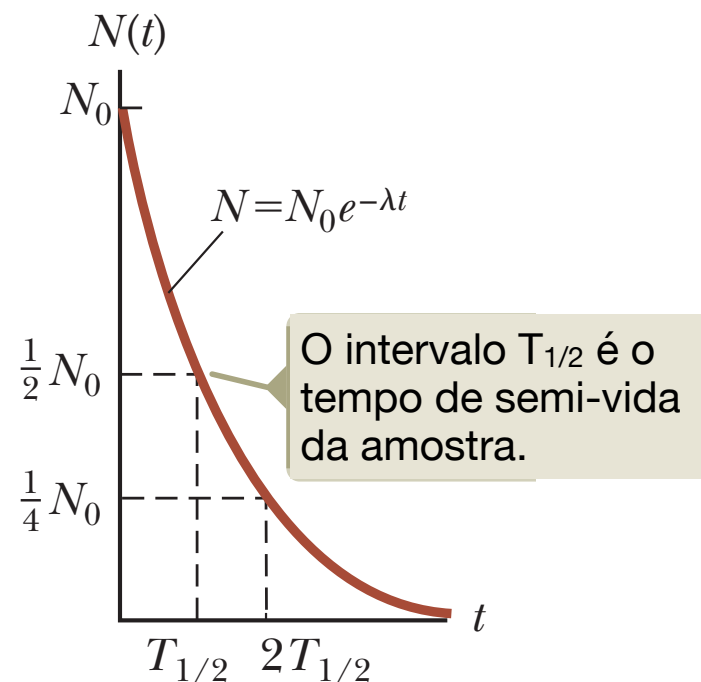
λ ... a constante do decaimento
(a probabilidade de um núcleo decair por unidade do tempo)

$dN = -N\lambda dt$ a alteração do número de núcleos (não decaídos) da amostra durante dt
↑ negativo porque N decresce

$$\frac{dN}{N} = -\lambda dt$$

$$\int_{N_0}^N \frac{dN'}{N'} = - \int_0^t \lambda dt'$$

$$\ln \frac{N}{N_0} = -\lambda t \quad N_0 = N(0)$$



$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$$

A lei do decaimento radioativo

O tempo de semi-vida $T_{1/2}$: $N(T_{1/2}) = N_0/2$

$$N_0/2 = N_0 e^{-\lambda T_{1/2}}$$

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}$$

Após $T_{1/2}$ metade da amostra terá decaído.