

# Revisão de conceitos de mecânica quântica

## • Quantização de energia

### A Radiação de corpo negro

Estudos de Planck (1900) sobre a radiação de corpo negro, levaram a ideia de que a energia é dependente da frequência da radiação.

$$E = nh \nu$$

sendo  $h$  a constante de Planck e  $n=1, 2, 3, \dots$  de forma que a energia pode assumir somente valores múltiplos inteiros do valor mínimo (energia discreta).

Átomos apresentam valores de energia discretos, chamados níveis de energia. Os níveis de energia correspondem aos estados de energia possíveis.

Sistemas nos quais a energia só pode assumir valores determinados, são ditos quantizados.

## • Ondas e partículas.

Efeito fotoelétrico → interpretado por Einstein (1905) a luz da teoria corpuscular.

Um fóton e uma partícula, por exemplo um elétron, tem a eles associados uma onda.

A energia  $E$  se relaciona à frequência  $\nu$  pela relação:

$$E = h \nu \quad (1)$$

e o momento  $p$  se relaciona ao comprimento de onda  $\lambda$  por:

$$p = \frac{h \nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (2)$$

*Note que nas relações 1 e 2, interligam os conceitos típicos de partículas e de onda  $E$  e  $p \Rightarrow \lambda, \nu$ .*

- **Ideias de quantização e o átomo de Bohr (1913)**

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$

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

- **Função de onda e equação de Schroedinger**

**Equação de Schroedinger dependente do tempo**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

**Sendo  $V$  a energia potencial**

- **Função de onda  $\psi(x,y,z,t)$**

$|\psi|$  → Está distribuída no espaço, para qualquer instante de tempo  $t$ . Não tem significado físico.

A probabilidade de encontrar uma partícula em um tempo e em ponto do espaço definidos só pode ser 0 ou 1.

- **Densidade de probabilidade  $\psi^2$**

$|\psi|^2$  → Probabilidade de encontrar a partícula descrita pela função de onda  $\psi$ , no ponto  $x, y, z$  e no tempo  $t$ .

## • Equação de Schroedinger e o Átomo de hidrogênio

Estado ligado próton-elétron, tratado como uma única partícula de massa  $m_p m_e / (m_p + m_e)$  sob a ação de um campo.

Sendo o sistema um estado ligado, podemos assumir o potencial independente do tempo e portanto aplicar a equação de Schroedinger independente do tempo a este sistema.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + [V(\vec{r}) - E] \psi$$

Visto que  $m_p \sim 1836 m_e$ , a massa do sistema se reduz a massa do elétron.

## • Átomo de hidrogênio

Pode-se assumir  $V$  como a energia potencial eletrostática entre o elétron e o próton,

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

A solução da equação de Schrodinger para o átomo de hidrogênio, fica simplificada, quando se considera a função de onda,

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

Sendo  $(r, \theta, \phi)$ , coordenadas polares.

Obtém-se assim três equações independentes entre si:

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} + m_1^2 \Phi \quad (1)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[ 1(1+1) - \frac{m_1^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta \quad (2)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[ \frac{2m}{h^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) - \frac{1(1+1)}{r^2} \right] R = 0 \quad (3)$$

**Exercício 1: obtenha as equações (1), (2) e (3).**

As soluções das equações (1) (2) e (3), levam aos números quânticos:

- Número quântico principal  $\rightarrow n = 1, 2, 3, \dots$   
*A energia total do átomo depende de  $n$ , portanto está ligado ao nível de energia no qual o elétron está localizado.*
- Número quântico azimutal ou orbital  $\rightarrow l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$   
*O momento angular azimutal depende de  $l$ , portanto está ligado aos subníveis de energia do elétron.*
- Número quântico magnético  $\rightarrow m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$   
*Ligado à energia do átomo quando este se encontra em um campo magnético externo.*

Sendo a função de onda do átomo, em termos dos números quânticos escrita como:

$$\Psi = R_{nl} \Theta_{m_l} \Phi_{lm_l}$$

$$n = 1; l = 0; m_l = 0$$

$$n = 2; l = 0, 1; m_l = -1, 0, +1$$

Portanto estados com a mesma energia total podem apresentar comportamento completamente diferentes, são ditos estados degenerados.

- **Quantização do momento angular  $L$**

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

ou seja,  $L$  é quantizado!

**Exercício 2: mostre que o momento angular orbital do elétron é dado por:**

## • A quantização do espaço

O número quântico orbital  $l$  determina a magnitude  $|L|$  do momento angular  $L$  do elétron.

O elétron girando em torno do núcleo pode ser visto como um anel de corrente envolvendo o próprio núcleo. Este anel de corrente produz um campo magnético  $B_{int}$ .

Assim, um elétron atômico que possui momento angular  $L$  interage com um campo magnético externo  $B_{ext}$ .

A magnitude do número quântico magnético,  $m_l$  especifica a direção de  $L$  determinando sua componente na direção do campo magnético externo  $B_{ext}$  conhecida como **quantização do espaço**.

Considerando a direção do campo magnético paralela ao eixo z, a componente de  $\mathbf{L}$  nesta direção será:

$$L_z = m_l \hbar$$

Com  $m_l = 0 \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ . Assim o número de orientações possíveis é  $2l + 1$ .

Observe que  $L$ , nunca estará perfeitamente Alinhado com o campo, pois  $L_z < L$ .

**Exercício 3: Explique porque somente Uma componente do momento angular  $L$  é quantizada.**

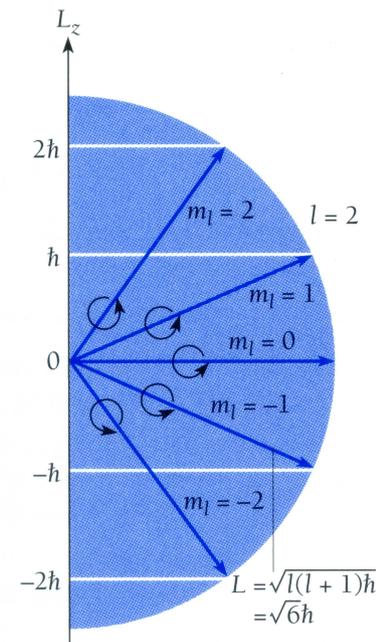


Fig. 6.4, Beiser.  $L = 2$ .  
5 valores possíveis de  $m_l$

# *Spin do elétron e princípio de exclusão de Pauli*

## **•O spin do elétron, observações experimentais**

Mecânica quântica até aqui apresentada não é capaz de fornecer uma descrição precisa da estrutura atômica.

Observáveis a serem entendidos.

## **•Estrutura fina do átomo de hidrogênio.**

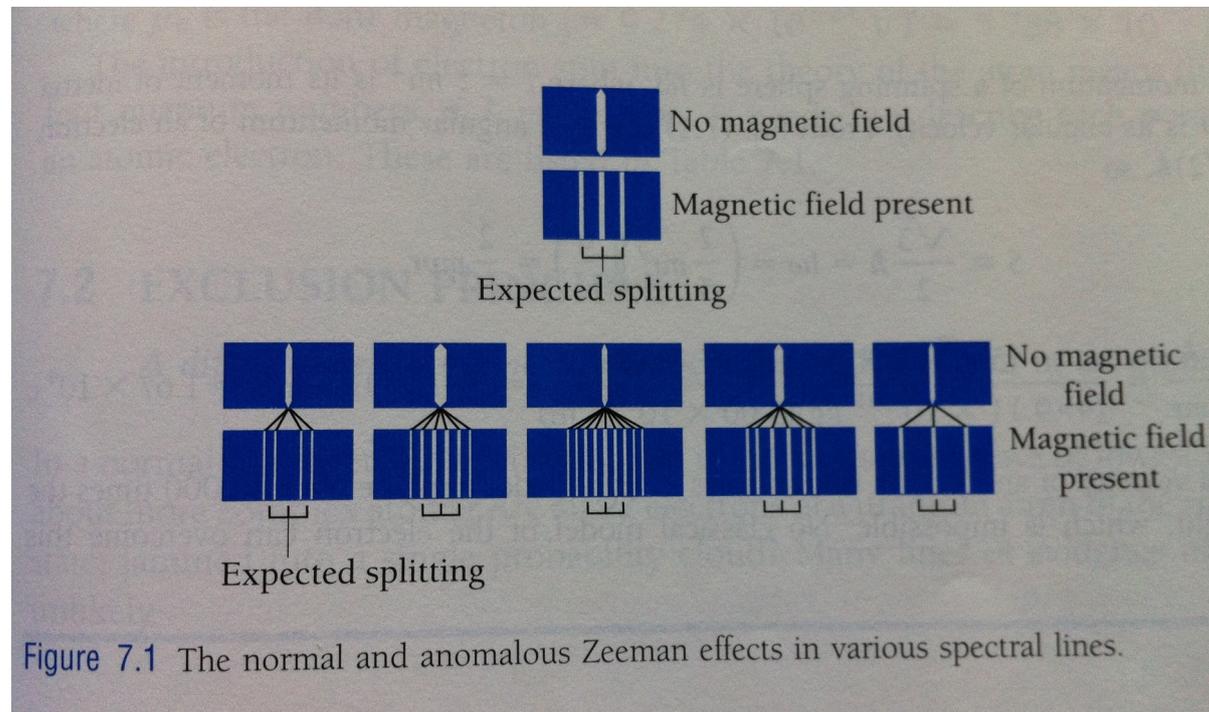
**Predição teórica:** uma única linha correspondente a  
 $\lambda = 656,3 \text{ nm}$

**Verificação experimental:** duas linhas separadas por 0,14 nm

- Efeito Zeeman

**Predição teórica:** átomo em um campo eletromagnético, com uma linha espectral dividida em três componentes.

**Observação experimental:** linha espectral pode se dividir em quatro, seis ou sete ou dividindo-se em três, não corresponder à previsão teórica do efeito Zeeman normal.



**Fig. 7.1, Beiser. Diagrama esquemático de efeito Zeeman normal e anômalo.**

## Solução do problema!

1925, Samuel Goudsmit e George Uhlenbeck

*“Cada elétron tem um momentum angular intrínseco, chamado spin, de mesma magnitude para todos os elétrons.”*

“Imagem clássica”: elétron como uma esfera carregada que gira em torno do seu eixo.

Associado ao elétron, momentum angular  $S$  e momento magnético  $\mu_S$

Esta imagem clássica não corresponde à realidade. O elétron é uma partícula elementar e se fosse uma esfera devido a sua dimensão reduzida giraria com velocidade superior à velocidade da luz.

A predição do spin do elétron foi consolidada pela mecânica quântica relativística desenvolvida por Paul Dirac, em 1929.

A **magnitude do momentum angular de spin  $S$**  do elétron é dada por:

$$S = \sqrt{s(s+1)} \hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$$

onde  $s=1/2$  é o número quântico de spin.

No exemplo a seguir mostramos uma falha da interpretação clássica do spin. Vamos então determinar a velocidade de um elétron considerando que ele seja uma esfera de raio  $r$ , que gira em torno do eixo que passa pelo seu centro com

$$r = 5,0 \times 10^{-17} \text{ m}$$

## Solução.

Segundo a hipótese considerada, a magnitude do momento angular de spin é igual à magnitude do momento angular devido à rotação do elétron,  $S = I \omega$

O momento de inércia de uma esfera homogênea é dado por:

$$I = \frac{2}{5} m r^2 \quad \text{e sua velocidade angular} \quad \omega = \frac{v}{r}$$

Logo temos:

$$\frac{\sqrt{3}}{2} \hbar = \left( \frac{2}{5} m r^2 \right) \left( \frac{v}{r} \right) = \frac{2}{5} m v r$$

$$v = \left( 5 \frac{\sqrt{3}}{4} \right) \frac{\hbar}{m r} = 1,67 \times 10^4 c$$

**Observe o resultado!**

De modo similar ao momentum angular orbital, o momentum angular de spin do elétron pode ter  $2s + 1$ , orientações, espaciais. Visto que o número quântico de spin do elétron é  $s = 1/2$ , há duas orientações possíveis, correspondentes ao spin up

$$m_s = +\frac{1}{2}$$

e spin down

$$m_s = -\frac{1}{2}$$

Da mesma forma, a componente do momentum angular de spin de um elétron ao longo de um campo magnético na direção  $z$  é dada por:

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

Considerando a razão giromagnética (razão entre o momentum magnético e angular) do spin igual a  $2S$ , o momento magnético de spin é:

$$\mu_s = -\frac{e}{m} S$$

A componente do momentum magnético de spin, ao longo do eixo  $z$  é dada por:

$$\mu_{sZ} = \pm \frac{e\hbar}{2m} = \pm \mu_B$$

onde  $\mu_B$  é o magneton de Bohr.

Com a introdução do spin do elétron, os estados de energia de um átomo são descritos pelos números quânticos  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  e  $m_s$ .

Experimento de Stern-Gerlach (1922) (quantização espacial)

Posteriormente interpretado como evidência experimental do spin do elétron.

Feixe de átomos de prata numa direção z, passando através de um sistema de colimadores imersos em um campo magnético variável, resultando em apenas duas componentes discretas do momento de dipolo magnético.

- **Princípio de exclusão de Pauli.**

**Wolfgang Pauli, 1925.**

“Dois elétrons em um átomo não podem existir num mesmo estado quântico”.

Evidência experimental pelo estudo de espectros atômicos aonde certas combinações de números quânticos correspondentes a estados esperados não eram observadas.

Exemplo: hélio, nenhuma transição observada para ou do estado fundamental no qual os spins dos elétrons têm a mesma direção. Transições observadas para spins de direções contrárias.

Pauli mostrou que cada estado ausente envolve dois ou mais elétrons com números quânticos idênticos.

Portanto o princípio de exclusão de Pauli permite a correta interpretação de muitas propriedades da matéria como veremos mais adiante.

# Estruturas atômicas e o princípio de exclusão de Pauli

- **Funções de onda: bósons e férmions**

Consideremos um sistema constituído por duas partículas 1 e 2 e autoestados  $\alpha$  e  $\beta$ .

Soluções possíveis da equação de Schroedinger, para este sistema, podem ser representadas por:

$$\begin{aligned}\psi_{1,2} &= \psi_{\alpha}(1) \psi_{\beta}(2) \\ \psi_{2,1} &= \psi_{\alpha}(2) \psi_{\beta}(1)\end{aligned}$$

As soluções apresentadas mostram que é possível distinguir qual partícula ocupa qual estado, ou seja, as partículas são distinguíveis.

Porém se as partículas são quanticamente idênticas, observáveis como a densidade de probabilidade, devem permanecer inalterados quando as partículas trocam de estado. Matematicamente a densidade de probabilidade deve permanecer inalterável sob a troca de índices  $1 \Leftrightarrow 2$ .

A densidade de probabilidade para a partícula 1 no estado  $\alpha$  e partícula 2 no estado  $\beta$ , é dada por:

$$\psi_{1,2}^* \psi_{1,2} = \psi_{\alpha}^*(1) \psi_{\beta}^*(2) \psi_{\alpha}(1) \psi_{\beta}(2)$$

enquanto que para a partícula 1 no estado  $\beta$  e a partícula 2 no estado  $\alpha$  é dada por:

$$\psi_{2,1}^* \psi_{2,1} = \psi_{\alpha}^*(2) \psi_{\beta}^*(1) \psi_{\alpha}(2) \psi_{\beta}(1)$$

Examinando a primeira expressão em relação a troca de índices, obtém-se:

$$\psi_{1,2}^* \psi_{1,2} = \psi_\alpha^*(1) \psi_\beta^*(2) \psi_\alpha(1) \psi_\beta(2) \rightarrow \psi_{2,1}^* \psi_{2,1} = \psi_\alpha^*(2) \psi_\beta^*(1) \psi_\alpha(2) \psi_\beta(1)$$

ou seja, a densidade de probabilidade é alterada pela troca de estado entre as partículas.

As funções de onda que representam as trocas de estados são definidas como:

**Simétrica**, o sinal permanece inalterado quando a partícula troca de estado, ou seja,  $\Psi_{1,2} = + \Psi_{2,1}$

**Antissimétrica**, há troca de sinal quando a partícula troca de estado, ou seja,  $\Psi_{1,2} = - \Psi_{2,1}$

A função de onda que descreve sistemas quânticos, compostos por partículas idênticas, é dada pela combinação linear:

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{\alpha}(1) \psi_{\beta}(2) \pm \psi_{\beta}(1) \psi_{\alpha}(2)]$$

onde os sinais +/-, representam as autofunções simétrica/antissimétrica.

Esta não é uma definição meramente matemática, ela representa importantes características físicas de sistemas quânticos.

Observe que a função de onda antissimétrica resulta nula se as partículas encontram-se no mesmo estado, enquanto que a função de onda simétrica não impõe esta restrição.

## *Princípio de Exclusão de Pauli.*

*Em sistemas de partículas descritas por autofunções antissimétricas, por exemplo, elétrons, a presença de uma partícula em um dado estado implica na impossibilidade de que uma segunda partícula venha a ocupar o mesmo estado quântico.*

## **Férmions**

São classificadas como férmions, todas as partículas que têm spin semi-inteiro e que são descritas por funções de onda antissimétricas. Portanto em um sistema de férmions partículas com mesmo números quânticos não podem ocupar o mesmo estado quântico. **Os férmions obedecem à estatística de Fermi-Dirac.**

## Bósons

São classificadas como bósons, todas as partículas que têm spin inteiro e que são descritas por funções de onda simétricas. Portanto em um sistema de bósons partículas com mesmos números quânticos podem ocupar o mesmo estado quântico. **Os bósons obedecem à estatística de Bose-Einstein.**

As partículas que compõem a matéria ordinária, isto é, prótons, neutrons e elétrons possuem spin semi-inteiro, são férmions. Esta propriedade é independente da partícula ser elementar ou não, isto é, ter estrutura interna.

Discutiremos em mais detalhes, no decorrer do curso, as propriedades das funções estatísticas e das partículas atualmente conhecidas.

## Resumo:

- **Férmions** – Obedecem ao princípio da exclusão de Pauli, autofunções anti-simétricas, spin ( $s$ ) semi-inteiro.

$$s = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar,$$

sendo  $n = 0, 1, 2, \dots$

- **Bósons** – Não obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, autofunções simétricas, spin ( $s$ ) inteiro.

$$s = n \hbar$$

- **A tabela periódica**

Dmitri Mendeleev (1869) – a busca pelo entendimento da estrutura da matéria.

Organizada em colunas e linhas de elementos com propriedades químicas semelhantes.

A organização da tabela periódica é explicada por meio das propriedades quânticas dos átomos e representa uma importante afirmação da mecânica quântica.

Seção 7.4 livro texto Beiser.

- **As camadas e subcamadas de elétrons nos átomos**

As propriedades físicas de um átomo podem ser compreendidas considerando-o como um sistema organizado em camadas e subcamadas.

A estrutura em camadas e subcamadas é determinada de modo que cada estado quântico particular seja ocupado somente por um elétron e que a energia total mínima do átomo corresponda ao seu estado mais estável.

Vamos examinar como a energia de um elétron varia em função do estado quântico.

Em átomos multieletrônicos podemos tratar os elétrons como sujeitos a um campo elétrico devido a carga  $Z_e$  decrescido da blindagem parcial dos outros elétrons que encontram-se próximos ao núcleo.

Elétrons que possuem o mesmo número quântico principal,  $n$ , encontram-se em níveis de energia similares, ou seja, ocupam a mesma camada atômica (K, L, M,... correspondentes a  $n=1,2,3,\dots$ ).

A energia dos elétrons aumenta com o aumento do número quântico principal  $n$ , mas apresenta também uma dependência com o número quântico orbital,  $l$ .

Elétrons com  $l$ , menores encontram-se mais próximos do núcleo, portanto sofrem menos a ação da blindagem. Consequentemente eles são mais ligados ao núcleo e portanto, têm energia total mais baixa.

Lembre-se que da solução da equação de Schroedinger, conclui-se que  $n = l + 1$ , ou seja,  $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$ . Por exemplo, para  $n=3$ ,  $l = 0, 1$  ou  $2$ .

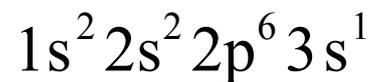
Em cada camada a energia do elétron aumenta a medida que  $l$  cresce.

Elétrons que dividem um certo valor de  $l$ , ocupam a mesma subcamada e têm energia similar.

Na notação representativa dos estados quânticos, cada subcamada é identificada pelo número quântico principal,  $n$ , seguido pelo número quântico orbital  $l$  e o superíndice representa o número de elétrons na subcamada.

Exemplo: sódio (Na)

$1s^2$  ( $n=1, l=0$ ),  $2s^2$  ( $n=2, l=0$ ), subcamadas com dois elétrons;  
 $2p^6$  ( $n=2, l=1$ ), subcamada com 6 elétrons;  
 $3s^1$  ( $n=3, l=0$ ), subcamada com 1 elétron.



O princípio de exclusão limita o número de elétrons que pode ocupar cada subcamada.

Cada subcamada é caracterizada pelos números quânticos  $n$  e  $l$ , sendo que o número quântico magnético pode assumir valores de  $-l$  à  $+l$ , ou seja,

$$m_l = -l, -l+1, \dots, +l-1, l$$

Por outro lado, cada elétron pode assumir um dos dois números quânticos de spin,

$$m_s = +\frac{1}{2} \text{ ou } m_s = -\frac{1}{2}$$

Portanto cada subcamada pode conter  $2(2l+1)$  elétrons.

O número máximo de elétrons que uma camada pode conter é a igual soma do número de elétrons contidos em suas subcamadas:

$$N_{max} = \sum_{l=0}^{l=n-1} 2(2l+1) = 2[1+3+5+\dots,+2n-1] = 2n^2$$

Assim, a camada K ( $n=1$ ) contém 2 elétrons, a camada L ( $n=2$ ) 8 elétrons, a camada M ( $n=3$ ) 18 elétrons e assim por diante.

*(Notação de camadas eletrônicas e tabela periódica.)*

Cada elétron do núcleo tem um momentum angular orbital  $L$  e um momentum angular de Spin,  $S$  que contribuem para o momentum angular total  $J$  do átomo.

- **O acoplamento spin-órbita**

O conceito de spin tem um importante papel no entendimento da estrutura fina observada em espectros atômicos.

A dupla estrutura fina de linhas espectrais surge da interação entre o momento angular orbital e de spin de um elétron atômico, que denominamos **acoplamento spin-órbita**.

Considere um modelo clássico simples, onde o elétron orbita em torno do núcleo. No referencial do elétron, ele sente um campo magnético devido ao movimento do núcleo e este campo magnético interage com o spin do elétron produzindo uma espécie de efeito Zeeman.

A energia potencial  $U_m$  de um dipolo magnético, de momentum  $\mu$ , em um campo magnético  $B$ , é dada por:

$$U_m = -\mu B \cos \theta$$

onde  $\theta$  é o ângulo entre  $\mu$  e  $B$ .

No caso do momento magnético de spin do elétron,

$$\mu \cos \theta = \mu_{SZ} = \pm \mu_B$$

Logo,

$$U_m = \pm \mu_B B$$

Portanto dependendo da orientação espacial do spin a energia do elétron em um átomo, será maior ou menor, por uma quantidade  $\mu_B B$ , que a sua energia sem acoplamento.

Assim, cada estado quântico exceto  $s$  onde  $l = 0$ , é dividido em dois estados.

Exemplo: Estime a energia magnética no estado  $2p$  de um átomo de hidrogênio, usando o modelo de Bohr, cujo estado  $n=2$ , corresponde ao estado  $2p$ .

### Solução:

Primeiramente precisamos calcular o campo magnético  $B$ . Para isto, consideremos o campo magnético no centro de um círculo de raio  $r$ , percorrido por uma corrente  $I$ . O campo magnético será dado por:

$$B = \frac{\mu_0 I}{2 r}$$

Considerando que o elétron gira em torno do núcleo de carga  $+e$ , com uma frequência  $f$ , o campo magnético será:

$$B = \frac{\mu_0 e f}{2 r}$$

O raio de Bohr, é dado por:

$$r_n = n^2 a_0$$

onde  $a_0 = 5,292 \times 10^{-11} \text{m}$ , o raio mais interno. A frequência  $f$ , neste movimento circular é expressa por:

$$f = \frac{v}{2 \pi r}$$

A velocidade do elétron, girando em um círculo de raio  $r$ , pode ser estimada igualando a força centrípeta à força elétrica:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \Rightarrow v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 mr}}$$

Substituindo convenientemente os valores obtém-se:

$$f = 8,4 \times 10^{14} \text{ s}^{-1} \quad , \quad r_2 = 2,1 \times 10^{-10} \text{ m}$$

Então,  $B = 0,40 \text{ T}$  e finalmente,

$$U_m = \mu_B B = 3,7 \times 10^{-24} \text{ J} = 2,3 \times 10^{-5} \text{ eV}$$

A diferença de energia entre os estados superior e inferior será portanto,

$$4,6 \times 10^{-5} \text{ eV}$$

Compatível com o valor observado experimentalmente.

## • Momentum angular de um átomo

Devido ao princípio da exclusão de Pauli, geralmente, os átomos e íons cujos elétrons distribuem-se em camadas fechadas, têm momentum angular total e magnético, iguais a zero. Portanto o momento angular total de átomos que têm um elétron excedente às camadas fechadas, é determinado por este elétron.

O momentum angular total do elétron é dado por:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

Sendo quantizado e de magnitude:

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar \quad , \quad \text{com } j = l + s = l \pm \frac{1}{2}$$

A componente  $J_z$  de  $\mathbf{J}$  na direção  $z$  é dada por:

$$J_z = m_j \hbar, \text{ sendo } m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$$

Átomos com um único elétron, possuem apenas duas orientações, uma correspondente a  $J > L$  ( $j = l + s$ ) e outra correspondente a  $J < L$  ( $j = l - s$ ).

A figura 7.15 do livro texto Beiser, mostra a intensidade de  $J$  para  $s = +1/2$  e  $s = -1/2$ , no caso de  $l = 1$ .

A figura 7.16, mostra os possíveis valores de número quântico magnético  $m_j$  e das componentes  $J_z$ , para o mesmo caso.

Qual o efeito sobre o momento angular total no casos em que há um campo magnético externo aplicado? (Veja a figura 7.17 do livro texto Beiser).

Para átomos nos quais o momentum angular total é resultante da contribuição de mais de um elétron, o momentum angular orbital de todos os elétrons se acoplam produzindo o momentum resultante  $L$ . Da mesma forma os momenta angular de spin, se acoplam produzindo o momentum resultante  $S$ , ou seja:

$$\mathbf{L} = \sum \mathbf{L}_i \quad , \quad \mathbf{S} = \sum \mathbf{S}_i \quad , \quad \mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$$

Este é o chamado acoplamento LS.

As magnitudes dos momentum  $L$ ,  $S$ ,  $J$  e suas componentes,  $L_z$ ,  $S_z$  e  $J_z$ , são expressas de modo similar ao caso de um elétron excedente, usando-se porém letras maiúsculas.

$$L = \sqrt{L(L+1)} \hbar \quad , \quad L_z = M_L \hbar$$

$$S = \sqrt{S(S+1)} \hbar \quad , \quad S_z = M_S \hbar$$

$$J = \sqrt{J(J+1)} \hbar \quad , \quad J_z = M_J \hbar$$

Sendo  $L$ ,  $S$ ,  $J$ ,  $M_L$ ,  $M_S$  e  $M_J$ , os respectivos números quânticos.

$L$  e  $M_L$ , são sempre inteiros ou 0, equanto que os demais números quânticos são inteiros se o número de elétrons é par e semi-inteiros se o número de elétrons é ímpar.

Exemplo: Determine os valores possíveis do número quântico, momentum angular total  $J$ , para dois elétrons com números quânticos orbitais  $l=1$  e  $l=2$ , considerando um acoplamento LS.

**Solução:** Os possíveis valores de  $\mathbf{L}$  e  $\mathbf{S}$ , estarão definidos nos intervalos:

$$\begin{aligned} |l_1 - l_2| &\text{ à } |l_1 + l_2| \\ |s_1 - s_2| &\text{ à } |s_1 + s_2| \end{aligned}$$

Portanto teremos:

$$L=1, 2 \text{ ou } 3 \quad \text{e} \quad S=0 \text{ ou } 1$$

O momento angular total  $\mathbf{J}$  estará compreendido entre  $|L-S|$  e  $|L+S|$ , portanto os valores possíveis para o momentum angular total do sistema constituído pelos dois elétrons são:

$$J=0, 1, 2, 3 \text{ e } 4.$$

Notação adotada, para identificar um estado de energia do átomo. Exemplo, estado fundamental do sódio:

$$3^2 S_{1/2}$$

O número 3, refere-se ao número quântico principal; o superíndice a multiplicidade de estados, no caso um dubleto; a letra S, ao momentum angular, no caso  $l=0$  e o índice  $1/2$ , refere-se ao momentum angular total  $j$ .

Portanto neste exemplo, temos para os números quânticos:

$n=3$ ,  $l=0$ ,  $j=1/2$ . Como  $m_j = -j, -j+1, \dots, +j$ ,  $m_j = \pm 1/2$ .

*Obs: Os núcleos atômicos também possuem momentos angular intrínseco e momentos magnéticos que contribuem para o momentos totais.*

*Como  $\mu_m$  nuclear  $\sim 10^{-3} \mu_m$  elétrico, o seu espaçamento d estrutura hiperfina é muito pequena comparada à dos átomos.*

## Bibliografia:

- Beiser, A. Concepts of Modern Physics, New York, McGraw-Hill, 1995.
- Caruso, F. & Oguri, V., Física Quântica - origens clássicas e fundamentos quânticos, Rio de Janeiro, Ed. LTC, 2016.
- Eisberg, R. & Resnick, R., Física Quântica, Rio de Janeiro, Ed. Campus, 1979