

Momento angular e spin total de electrões

André Reis nº 65671 João Abrantes nº 66091

Física Quântica da Matéria

Instituto Superior Técnico

21/04/2011

Resumo

Pretende-se com este exercício estudar o momento angular total (J) e o spin total (S) de três átomos diferentes, lítio (cujo número atómico Z é igual a 3), boro ($Z=5$) e alumínio ($Z=13$). Feitas as contas, e aplicando a teoria necessária obteve-se para todos eles um $J=1/2$ e um $S=1/2$.

Introdução

O objectivo deste problema é, mais do que matemático, perceber a física teórica que está por trás do cálculo do J e do S . Para tal, comecemos por fazer uma breve introdução teórica.

Recorrendo à mecânica clássica, em princípio, é possível dizer que uma partícula x está num estado a e que outra partícula y se encontra num estado b . Porém, quanticamente falando isto não é possível. Todos os electrões são idênticos. A mecânica quântica lida com o princípio de que as partículas são indistinguíveis, logo, para duas partículas a função de onda possível é:

$$\Psi_{\pm}(r_1, r_2) = A[\Psi_a(r_1)\Psi_b(r_2) \pm \Psi_b(r_1)\Psi_a(r_2)]$$

A partícula 1 pode estar no estado a e a 2 no estado b ou vice-versa, não temos essa certeza, portanto consideram-se as duas hipóteses.

A teoria admite dois tipos de partículas idênticas: os bosões (partículas de spin inteiro), para as quais se utiliza o sinal “+” na expressão anterior. Este sinal de “+” faz com que a função de onda dos bosões seja simétrica. E os fermiões (partículas de spin meio inteiro), cujo sinal utilizado é o “-”, tornando a função de onda dos fermiões anti-simétrica, comprovando assim o princípio de exclusão de Pauli que diz que

dois fermiões não podem ocupar o mesmo estado quântico simultaneamente.

Verifica-se isto através da função de onda anterior fazendo as duas partículas com estados iguais:

$$\Psi_{-}(r_1, r_2) = A[\Psi_a(r_1)\Psi_a(r_2) - \Psi_a(r_1)\Psi_a(r_2)] = 0$$

O spin dos electrões é igual a $1/2$ portanto estes são fermiões.

Desenvolvimento do Problema

Como já foi referido, este problema será dividido em três partes, uma correspondente a cada átomo. Comecemos por tratar o caso do lítio cuja configuração electrónica é a seguinte:

$$(1s)^2(2s)$$

Nas camadas fechadas temos todos os estados $2(2l+1)$ ocupados. Para uma camada na orbital l , o m_l varia entre $-l$ a l . Ou seja, o m_l pode ter $2l+1$ valores diferentes. Para cada valor de m_l o electrão pode ter o spin *up* ou o spin *down* daí o número total de estados por camada l ser $2(2l+1)$. Podemos então agrupar os electrões dois a dois em que ambos tenham o m_l e o l igual. Para estes pares de electrões a função de onda orbital é par na troca de dois

electrões portanto a função de onda de spin terá de ser ímpar (singleto, $S=0$) de modo a respeitar a anti-simetria intrínseca dos fermiões.

O spin total é então dado pelo spin da última camada, que está incompleta, preenchida apenas por um electrão, logo $S=1/2$.

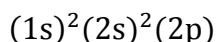
Relativamente ao momento orbital angular (L), este está relacionado com a forma das orbitais. Sabe-se que para a orbital s o l correspondente é zero e para a p é igual a um. Aqui, como todas as orbitais são s , e como o momento orbital total (L) é dado por: $L=l_1+l_2, l_1+l_2-1, \dots, |l_1-l_2|$, o L do lítio será igual a zero.

Com estes dois valores, sabemos o momento angular total que é dado por:

$$J=L+S, L+S-1, L+S-2, \dots, |L-S|$$

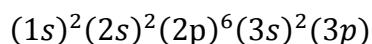
De onde vem que $J=1/2$.

No caso do boro, temos a seguinte configuração electrónica:



Pelas razões já referidas o spin total será dado pela camada incompleta, portanto o S será igual a $1/2$. O momento orbital (L) será igual a 1. Portanto o J poderia ser igual a $3/2$ ou $1/2$. Mas pela terceira regra de Hund que nos diz que quando uma subcamada (n, l) está preenchida com menos de metade da sua capacidade máxima o estado com menor energia será quando $J=|L-S|$. Neste caso a camada $2p$ tem apenas um electrão e a sua capacidade máxima são 6 electrões portanto o J será igual a $1/2$.

Por último temos o alumínio cuja configuração electrónica é:



Mais uma vez o spin total será dado pela camada incompleta sendo portanto igual a $1/2$. O momento orbital (L) será outra vez igual a 1 uma vez que para as camadas

completas o L correspondente ao estado de menor energia é igual a zero. Uma vez mais o J poderia ser igual a $3/2$ ou $1/2$ mas de acordo com a terceira lei de Hund o J será igual a $1/2$.

Resultados e Discussão

Podemos compactar os resultados já referidos, escrevendo-os em notação espectroscópica obtendo assim para o lítio $^2S_{1/2}$ e para os outros dois átomos $^2P_{1/2}$. A notação espectroscópica é dada de uma forma geral por $^{2S+1}L_J$, onde o S e J são escritos numericamente e o L é escrito com a sua letra correspondente.

Uma questão pertinente a colocar sobre a configuração electrónica do lítio é o porquê do terceiro electrão ir ocupar uma camada s e não uma p , ambas com o mesmo nível de energia $n=2$. Sem haver interacções electrónicas têm as duas o mesmo nível de energia, este depende do número quântico n e não do l . Mas com o efeito da repulsão electrónica entre os electrões tal já não acontece. Com o aumento do l , os electrões estendem-se mais no espaço fazendo com que o efeito *screening*, criado pelos electrões mais interiores, aumente. O electrão mais interno “vê” a carga total do núcleo e o mais afastado “vê” uma carga efectiva que é menor que a carga do núcleo diminuindo a energia de ligação e fazendo com que a orbital com o l mais pequeno seja a de menor energia e portanto a preferida pelo electrão. Esta explicação aplica-se a todos os casos, sendo neste problema relevante para os átomos de lítio e de alumínio. No caso do alumínio o último electrão vai ficar na camada $3p$ e não na $3d$ pelas mesmas razões.

Conclusões

Concluimos que para analisar a configuração electrónica de um átomo, o spin, momento orbital e angular totais de cada átomo, temos sempre que investigar qual o estado que irá minimizar a energia.

É importante ter em conta tanto o principio de exclusão de Pauli, já referido, tal como, ainda que empíricas, as regras de Hund.

Os modelos simplificados ajudam-nos muitas vezes a perceber mais intuitivamente os problemas mas por vezes chegamos a conclusões erradas. Como por exemplo, usando o modelo simplificado em que os electrões não interagem uns com os outros chegaríamos à conclusão errada que o último electrão do lítio tanto poderia estar no estado 2s como no 2p. Devemos usar os modelos simples de forma a facilitar os cálculos mas não deixando de ter em conta as aproximações que foram feitas de forma a sabermos identificar os resultados errados que por vezes surgem do uso desses modelos.

Referências:

[1] Introduction to Quantum Mechanics, David J. Griffiths, Second Edition, Prentice Hall;

[2] Quantum Physics, Stephen Gasiorowicz, Third Edition, Wiley;

[3] http://en.wikipedia.org/wiki/Hund's_rules;

[4] http://en.wikipedia.org/wiki/Pauli_exclusion_principle .