

# **NOVA** **DIDACTA**

*Sistemas Didáticos*



**PHYWE**

## **Estrutura Física da Matéria**

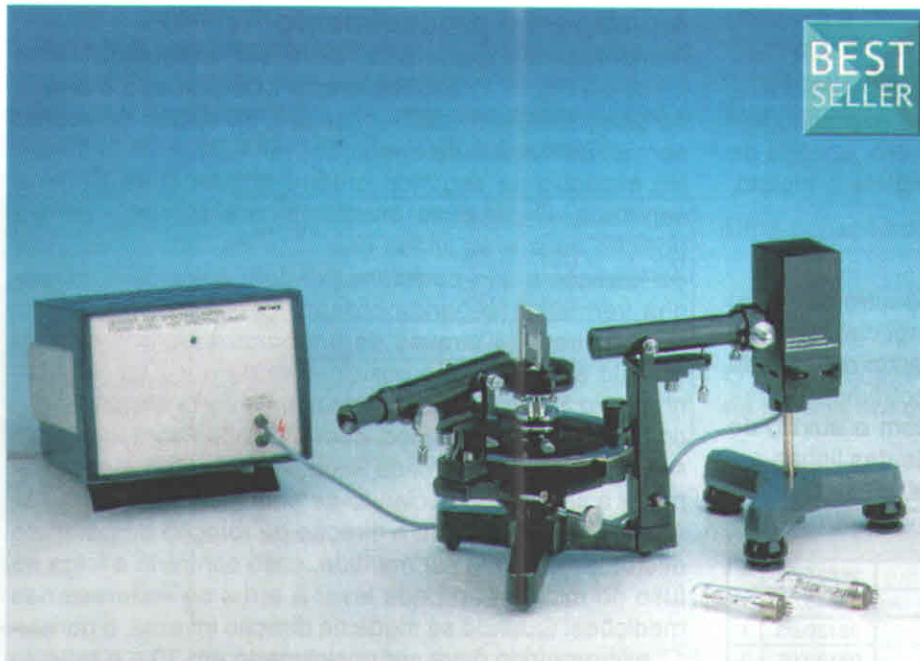
**Estrutura Fina, Espectro de Um Elétron e Dois Elétrons**

**P2510600**

# MANUAL DO USUÁRIO

*Soluções Tecnológicas*





#### O que você pode aprender sobre este assunto...

- Espectrômetro de difração (ou de prisma)
- Spin
- Momento angular
- Interação de momento angular spin-órbita
- Multiplicidade
- Nível de energia
- Energia de excitação
- Regras de seleção
- Dubletos
- Parahélio
- Ortohélio
- Energia de conversão
- Momento angular
- Estados singlete e tripleto
- Transição proibida

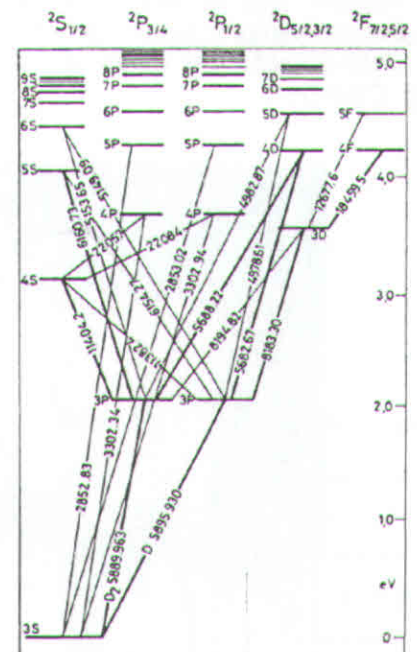
#### Princípio:

As bem conhecidas linhas espectrais (espectro de raios) do He são utilizadas para calibração do espectrômetro de prisma. Os comprimentos de onda do espectro de raios do Na, Hg, Cd e Zn são determinados utilizando-se o espectrômetro.

O que você necessita:		
Espectrômetro / Goniômetro com vernier	35635.02	1
Rede de difração, 600 linhas/mm	08546.00	1
Lâmpada espectral de He, pico 9 base	08120.03	1
Lâmpada espectral de Na, pico 9 base	08120.07	1
Lâmpada espectral de Hg 100, pico 9 base	08120.14	1
Lâmpada espectral de Cd, pico 9 base	08120.01	1
Lâmpada espectral de Zn, pico 9 base	08120.11	1
Alimentação de em energia para as lâmpadas espectrais	13662.97	1
Suporte de lâmpada, pico 9, para lâmpadas espectrais	08119.00	1
Base em tripé - PASS -	02002.55	1
Conjunto completo do equipamento com manual incluído em um CD-ROM		
Estrutura fina, espectro de um elétron e de dois elétrons P2510600		

#### Tarefas:

1. Calibração do espectrômetro utilizando o espectro do He, e a determinação da constante de rede;
2. Determinação do espectro do Na;
3. Determinação do desdobramento de estrutura fina.
4. Determinação das linhas espectrais mais intensas do Hg, Cd e Zn.



Espectro do Sódio.



### Tópicos relacionados

- Espectrômetro de difração (ou de prisma), Spin, momento angular, interação de momento angular spin-órbita, multiplicidade, nível de energia, energia de excitação, regras de seleção, dupletos, parahélio, ortohélio, energia de conversão, momento angular, estados singleto e tripleto, transição proibida

### Princípio:

As bem conhecidas linhas espectrais (espectro de raios) do He são utilizadas para calibração do espectrômetro de prisma. Os comprimentos de onda do espectro de raios do Na são determinados utilizando-se o espectrômetro.

O espectrômetro de prisma é calibrado com o auxílio do espectro do He. Os comprimentos de onda das linhas espectrais do Hg, Cd e Zn são determinados.

Equipamento:		
Espectrômetro / Goniômetro com vernier	35635.02	1
Rede de difração, 600 linhas/mm	08546.00	1
Lâmpada espectral de He, pico 9 base	08120.03	1
Lâmpada espectral de Na, pico 9 base	08120.07	1
Lâmpada espectral de Hh 100, pico 9 base	08120.14	1
Lâmpada espectral de Cd, pico 9 base	08120.01	1
Lâmpada espectral de Zn, pico 9 base	08120.11	1
Alimentação de em energia para as lâmpadas espectrais	13662.97	1
Suporte de lâmpada, pico 9, para lâmpadas espectrais	08119.00	1
Base em tripé - PASS -	02002.55	1

### Tarefas:

1. Calibração do espectrômetro utilizando o espectro do He, e a determinação da constante de rede;
2. Determinação do espectro do Na;
3. Determinação do desdobramento de estrutura fina.
4. Determinação das linhas espectrais mais intensas do Hg, Cd e Zn.

### Montagem e procedimento

A montagem experimental deve ser executada como mostra a Fig. 1. O espectrômetro / Goniômetro e a rede de difração devem ser montados e ajustados de acordo com as instruções de operação.

No espectro de segunda ordem, a linha D do Sódio é separada. O parafuso micrométrico é ajustado para a posição zero e as linhas cruzadas do retículo do visor do telescópio são posicionadas para coincidir com a linha vermelha (segunda ordem). O telescópio tem sua posição travada através de um parafuso apropriado. O retículo é inicialmente posicionado na onda longa da linha D do Sódio e depois na sua onda curta com o auxílio do parafuso micrométrico, com a posição do micrômetro sendo anotada para cada situação. Também é possível medir a separação iniciando-se pelo lado da onda curta. A única ressalva é que a direção de rotação do parafuso micrométrico deve ser mantida, caso contrário a folga no fuso do micrômetro pode levar a erros de histerese nas medições. Quando se mede na direção inversa, o parafuso micrométrico deve ser posicionado em 10 e o retículo da ocular do microscópio deve novamente ser posicionado para coincidir com a linha vermelha (segunda ordem). Para a determinação quantitativa dos comprimentos de onda, o parafuso micrométrico deve ser calibrado para toda a circunferência. As lâmpadas espectrais adquirem sua potência máxima de iluminação após serem aquecidas por aproximadamente 5 minutos. O suporte da lâmpada deve ser ajustado de forma que o ar possa circular livremente através das fendas de ventilação. Antes de trocar as lâmpadas espectrais, um período de resfriamento deve ser aguardado porque as toalhas de papel ou flanelas utilizadas na substituição podem ficar aderidas no vidro da lâmpada e isto irá danificá-la.



Fig. 1: Montagem experimental para a determinação das linhas espectrais do Na.



**Teoria e avaliação**

1. Se a luz com um comprimento de onda  $\lambda$  incide em uma rede de difração com espaçamento constante  $d$ , ela é difratada. As intensidades máximas são produzidas se o ângulo de difração  $\alpha$  satisfaz as condições a seguir:  
 $n \cdot \lambda = d \cdot \sin \alpha$ ;  $n = 0, 1, 2 \dots$

vermelho	667,8 nm
amarelo	587,6 nm
verde	501,6 nm
azul esverdeado	492,2 nm
verde azulado	471,3 nm
azul	447,1 nm

Tabela 1: Comprimentos de onda do espectro do Hélio

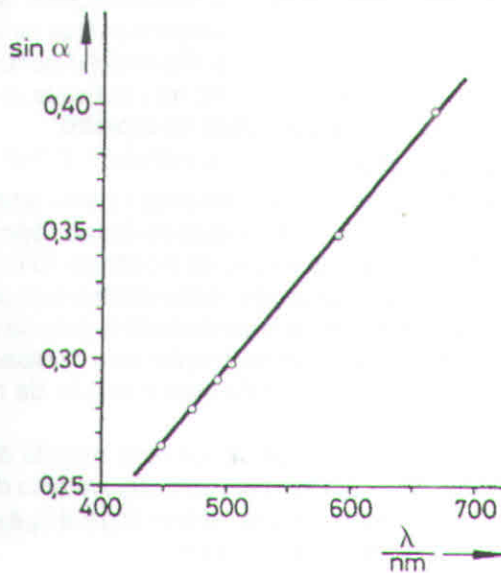


Fig. 2: Curva de calibração do espectrômetro de difração.

A curva de calibração do espectrômetro de difração (Fig.2) é apresentada em um gráfico para a primeira ordem ( $n=1$ ) e os ângulos medidos  $\alpha$ . A constante de grade é  $d = 1684 \text{ nm}$ .

Este valor pode variar para diferentes grades de difração. 2. A excitação dos átomos de Na é produzida pelo impacto dos elétrons. A diferença de energia produzida pelo retorno dos elétrons do nível de excitação  $E_1$  ao estado original  $E_0$  é emitida por um fóton de frequência  $f$  dada por:

$$hf = E_1 - E_0$$

onde  
 $h$  = constante de Planck  
 $= 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ .

Para uma primeira aproximação os elétrons do contorno completo interior produzem uma projeção do potencial  $V$  devido à carga sobre o núcleo, em relação ao único elétron externo, mas o potencial depende da posição:

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

onde  $e$  é a carga do elétron.

Os níveis de energia são similares aos encontrados no hidrogênio, com um enfraquecimento reduzido do momento angular.

$$E_{nl} = - \frac{me^2}{8h^2} z_{nl}^2 \frac{1}{n^2}$$

Uma equação de aproximação para  $E_{nl}$  é dada abaixo:

$$E_{nl} = - \frac{me^2}{8h^2} \frac{1}{(n - \mu_{nl})^2} \quad (1)$$

O defeito quântico  $\mu_{nl}$  depende levemente de  $n$  e diminui na medida em que  $l$  aumenta.

$n \setminus l$	0	1	2	3	4
3	1.35	0.85	0.01		
4				0.00	
5					0.00

Tabela 2:  $\mu_{nl}$  do átomo de Na.

A interação do spin  $\vec{S}$  do elétron com o seu momento angular eleva o enfraquecimento do momento angular total:

$$j = \left| l + \frac{1}{2} \right| \dots \left| l - \frac{1}{2} \right|,$$

onde  $l$  é o momento angular orbital do elétron externo. Se considerarmos o termo de interação na teoria de perturbação:

$$H = \xi(r) \vec{S} \cdot \vec{l}$$

nós obtemos o seguinte para (1)

$$E_{nlj} = E_{nl} + \xi_{nl} \frac{1}{2} (j(j+1) - S(S+1) - l(l+1))$$

e como desdobramento:

$$E_{nlj} = l + \frac{1}{2} - E_{nlj} = l - \frac{1}{2} (2l + 1) \xi_{nl}$$

As linhas a seguir do átomo de Na foram medidas no espectro de primeira ordem:

vermelho	617,2 nm
amarelo	588,4 nm
verde amarelado	567,7 nm
verde	514,1 nm
azul esverdeado	498,7 nm

Tabela 3: Comprimentos de onda determinados experimentalmente para o espectro do Na.



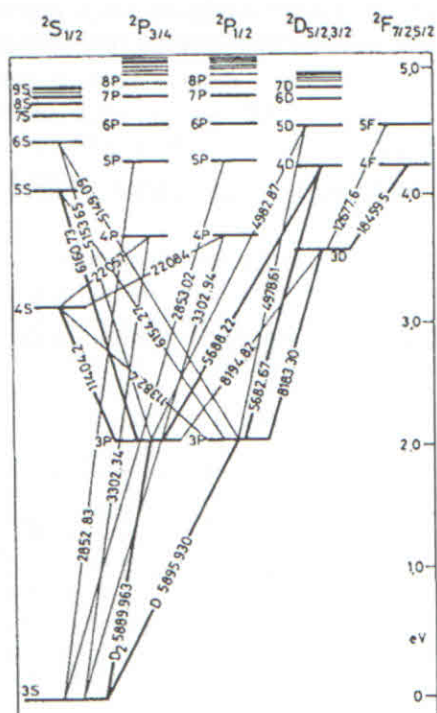


Fig. 3: Espectro do Sódio.

A separação da linha amarela foi determinada no espectro de segunda ordem. Em primeiro lugar, o comprimento de onda da linha mais curta do sódio no espectro de segunda ordem foi determinado:  
 $\lambda_1 = 588,6 \text{ nm}$

A diferença entre a onda curta e a onda longa da linha espectral do sódio foi então determinada utilizando-se o para-fuso micrométrico:  
 $\lambda_2 - \lambda_1 = 0,614 \text{ nm}$

**Montagem e procedimento com o espectrômetro de prisma**

A montagem experimental deve ser feita como mostrado na Fig. 4. O espectrômetro / goniômetro e o prisma devem ser montados e ajustados de acordo com as instruções de operação.

As lâmpadas espectrais adquirem sua potência máxima de iluminação após serem aquecidas por aproximadamente 5 minutos. O suporte da lâmpada deve ser ajustado de forma que o ar possa circular livremente através das fendas de ventilação. Antes de trocar as lâmpadas espectrais, um período de resfriamento deve ser aguardado porque as toalhas de papel ou flanelas utilizadas na substituição podem ficar aderidas no vidro da lâmpada e isto irá danificá-la. A escala iluminada é utilizada para gravação do espectro.

**Teoria e avaliação**

Quando a luz com comprimento de onda  $\lambda$  passa através de um prisma, ela é desviada. O ângulo de desvio depende da geometria do prisma e do ângulo de incidência. O índice de refração de um prisma depende do comprimento de onda da luz refratada, e então também depende do ângulo de desvio. A Fig. 5 mostra a curva de calibração para o espectro de He (curva de dispersão), obtido para o ângulo de mínimo desvio.

A excitação dos átomos é produzida pelo impacto dos elétrons. A diferença de energia produzida pelo retorno dos elétrons do nível de excitação  $E_1$  ao estado original  $E_0$  é emitida por um fóton de frequência  $f$  dada por:

$$hf = E_1 - E_0$$

onde

$h$  = constante de Planck

$$= 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ Js.}$$



Fig. 4: Montagem experimental para a medição do espectro de Hg, Cd e Zn.



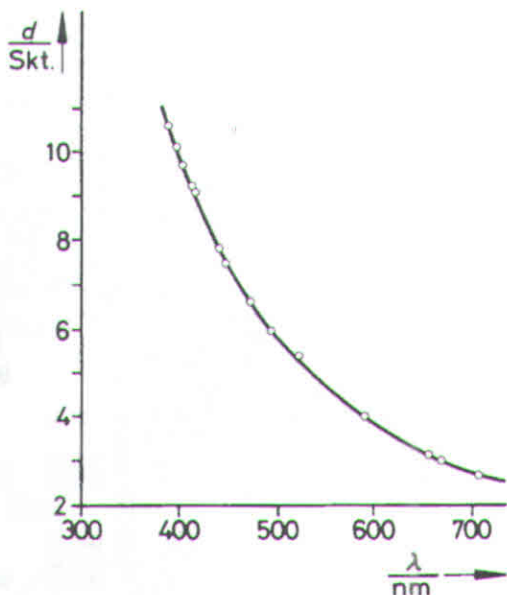


Fig. 5: Curva de calibração para o espectrômetro de prisma.

O operador hamiltoniano (não relativístico) para os dois elétrons 1 e 2 do átomo de He é:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - \frac{2e^2}{|\vec{r}_1|} - \frac{2e^2}{|\vec{r}_2|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

onde  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ .

$m$  e  $e$  representam a massa e a carga do elétron respectivamente,

$$\Delta_i = \frac{d^2}{dx_i^2} + \frac{d^2}{dy_i^2} + \frac{d^2}{dz_i^2}$$

é o operador de Laplace, e  $\vec{r}_i$  é a posição do  $i$ -ésimo elétron. A energia de interação spin-órbita

$$E_{so} \propto \frac{Z^4}{4 \cdot (137)^2}$$

foi ignorada no caso da carga nuclear  $Z = 2$  do hélio, porque ela é pequena quando  $Z$  é pequeno.

Se nós considerarmos

$$\frac{e}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

como sendo o termo de interação elétron-elétron, os valores característicos do operador Hamiltoniano sem interação são os mesmos do átomo de hidrogênio:

$$E_{n,m}^0 = -\frac{me^2}{8h^2} \left( \frac{1}{n^2} + \frac{1}{m^2} \right)$$

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

Como a probabilidade de transição para excitação simultânea de dois elétrons é muito menor do que para a excitação de um elétron, o espectro de energia do sistema em repouso é dado por:

$$E_{n,m}^0 = -\frac{me^2}{8h^2} \left( 1 + \frac{1}{m^2} \right)$$

$m = 1, 2$

O termo de interação supera o enfraquecimento do momento angular do espectro do hidrogênio puro e o enfraquecimento da energia de conversão. Isto resulta em um ajuste de energia:

$$E_{nl\pm}^1 = \langle \phi_{nl\alpha}^{\pm} | \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} | \phi_{nl\alpha}^{\pm} \rangle = C_{nl} \pm A_n$$

no qual  $\phi_{nl\alpha}^{\pm}$  são as funções de onda de duas partículas em repouso anti simétricas com componentes de posição simétricas ( $\phi^+$ ) ou anti simétricas ( $\phi^-$ ),  $l$  é o número quântico do momento angular, e  $\alpha$  é o conjunto dos outros números quânticos requeridos.

No caso atual, o momento angular orbital do elétron do elétron único  $l$  é igual ao momento angular total dos dois elétrons, dado por  $L$ , já que somente excitações de uma partícula estão sendo consideradas e o segundo elétron permanece no estado fundamental ( $l=0$ ).

$C_{nl}$  e  $A_n$  representam a energia de Coulomb e a energia de conversão respectivamente. Elas são positivas. O acoplamento do momento angular orbital  $L$  com o spin total  $S$  produz para  $S = 0$ , isto é  $\phi^+$ , uma série singleto e para  $S = 1$ , isto é  $\phi^-$ , uma série tripleto. Por causa da falta de interação spin-órbita, a divisão dentro de um tripleto é leve. Como as funções de ondas perturbadas são funções características para  $S^2$  e como  $S^2$  permuta com o operador dipolar, a regra de seleção

$$\Delta S = 0$$

(que é característica para sistemas de 2 elétrons com um número de mudança nuclear baixo) resulta e proíbe transições entre os níveis tripleto e singleto.

Em adição, independentemente da interação spin-órbita, a regra de seleção para o momento angular total

$$\Delta J = 0, \pm 1$$

se aplica, exceto onde

$$J = 0 \rightarrow J' = 0.$$

Se a interação spin-órbita é leve, então

$$\Delta L = 0, \pm 1$$

se aplica.

Cálculos detalhados produzem o espectro do hélio da Fig. 6.

Fig. 6: Espectro do hélio.

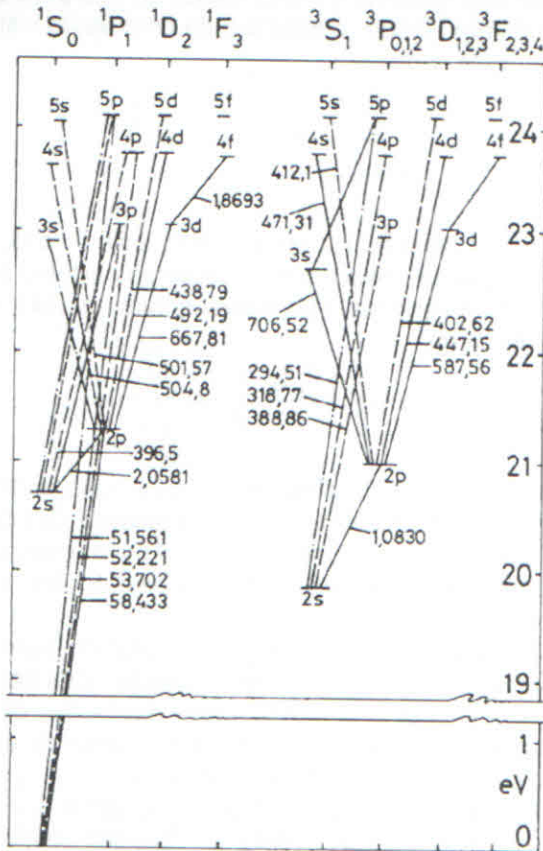
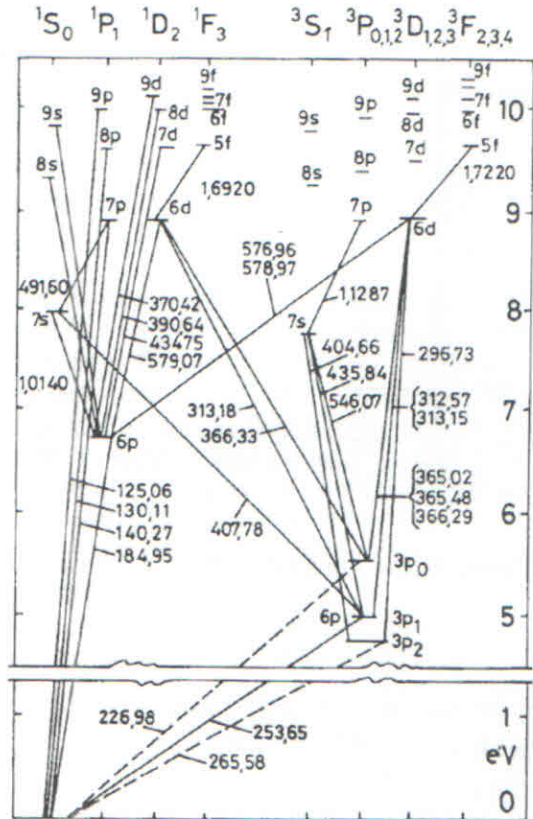


Fig. 7: Espectro do mercúrio.



Hg, Cd e Zn também são sistemas de dois elétrons e possuem a estrutura de 2 séries. A interação spin-órbita, entretanto, é relativamente evidente de forma que somente o momento angular total

$$J = L + S$$

é um parâmetro de conservação de energia. A divisão dentro de um tripleto é evidente. Além disso, a regra de seleção

$$\Delta S = 0$$

não é mais válida porque S não é mais um parâmetro de conservação (transição de L-S para o acoplamento j-j).

Tabela 4: Espectro de He-I.

Colour	$\lambda$ /nm	Transition	Relative intensity
red	706.5	$3^3S \rightarrow 2^1P$	5
red	667.8	$3^1D \rightarrow 2^1P$	6
red	656.0	He II	4-6
yellow	587.6	$3^3D \rightarrow 2^3P$	10
green	504.8	$4^1S \rightarrow 2^1P$	2
green	492.2	$4^1D \rightarrow 2^1P$	4
blue	471.3	$4^3S \rightarrow 2^3P$	3
blue	447.1	$4^3D \rightarrow 2^3P$	6
blue	438.8	$5^1D \rightarrow 2^1P$	3
violet	414.4	$6^1D \rightarrow 2^1P$	2
violet	412.1	$5^3S \rightarrow 2^3P$	3
violet	402.6	$5^3D \rightarrow 2^3P$	5
violet	396.5	$4^1P \rightarrow 2^1S$	4
violet	388.9	$3^3P \rightarrow 2^3S$	10

Tabela5: Espectro medido do Hg-1

Colour	$\lambda$ /nm	Transition
red	690	$8^3P_2 \rightarrow 7^3S$
red	624	$9^1P \rightarrow 7^1S$
red	611	$8^1P \rightarrow 7^3S$
red	608	$8^1P \rightarrow 7^1S$
yellow	578	$6^3D_2, 6^3D_1$
		$6^1D_2 \rightarrow 6^1P_1$
green	548	$7^3S \rightarrow 6^3P_1$
blue-green	496	Hg II
blue-green	492	$8^1D \rightarrow 6^1P_1$
blue	435	$7^1D \rightarrow 6^1P_1$
violet	408	$7^1S \rightarrow 6^3P_1$



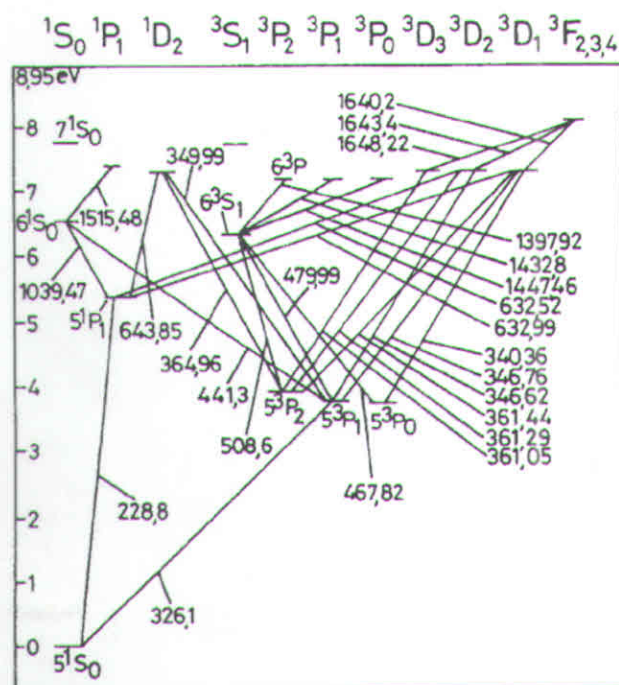


Fig. 8: Espectro do Cd

Colour	$\lambda$ /nm	Transition
red	645	$6^1D_2 \rightarrow 5^1P_1$
red	633	$5^3D_1 \rightarrow 5^1P_1$
green	517	$7^1S_0 \rightarrow 5^1P_1$
green	509	$6^3S_1 \rightarrow 5^3P_2$
blue	480	$6^3S_1 \rightarrow 5^3P_1$
blue	469	$6^3S_1 \rightarrow 5^3P_0$
violet	441	$6^1S_0 \rightarrow 5^3P_1$

Tabela 6: Espectro medido do Cd.

Colour	$\lambda$ /nm	Transition
red	636	$4^1P_1 \rightarrow 4^1D_1$
yellow	589	Zn II
yellow	579	$\begin{cases} 5^3S_1 \rightarrow 7^3P_2 \\ 5^3S_1 \rightarrow 7^3P_1 \end{cases}$
green	534	$5^3S_1 \rightarrow 8^3P_0$
green	519	$4^1P_1 \rightarrow 6^1S_0$
green	508	$5^3S_1 \rightarrow 9^3P_1$
blue	481	$4^3P_2 \rightarrow 5^3S_1$
blue	472	$4^3P_1 \rightarrow 5^3S_1$
blue	468	$4^3P_0 \rightarrow 5^3S_1$
violet	463	$4^1P_1 \rightarrow f^1D_2$
violet	429	$\begin{cases} 4^3P_1 \rightarrow 5^1S_0 \\ 4^1P_1 \rightarrow 7^1S_0 \end{cases}$

Tabela 7: Espectro medido do Zn.