

# **Universidade de São Paulo**

## **Instituto de Física**

# **FÍSICA MODERNA I**

---

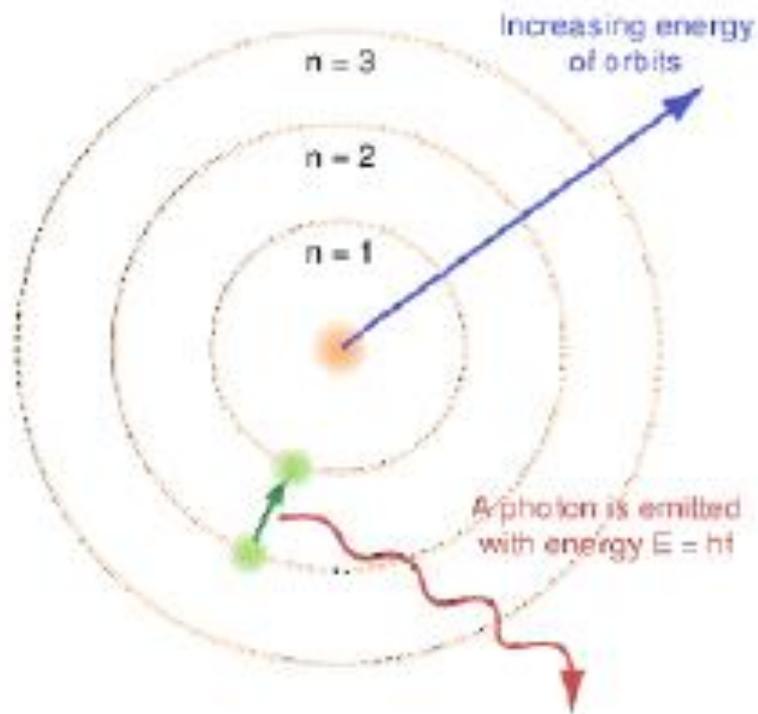
## **AULA 11**

**Profa. Márcia de Almeida Rizzutto**  
**Pelletron – sala 220**  
**rizzutto@if.usp.br**

**2o. Semestre de 2018**  
**Monitor: Felipe Prado**

<https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=64495>

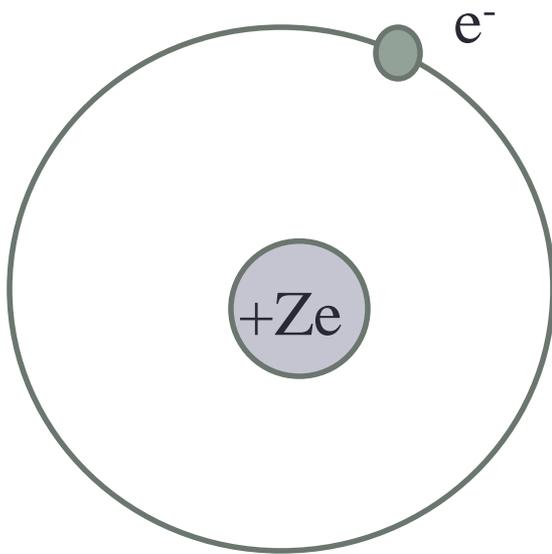
# O Modelo de Bohr



- Orbita circular
- $L = n\hbar$
- Energia total constante

- $$\nu = \frac{E_i - E_f}{h}$$

# O Modelo de Bohr



- Átomo com núcleo de carga  $Ze$  e massa  $M$  e elétron com carga  $-e$  e massa  $m_e$
- $m_e$  desprezível em relação a  $M$
- Estabilidade mecânica
- Força centrípeta = Força Coulombiana

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

$$mv^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

- Momento angular

$$\left. \begin{array}{l} L = n\hbar \\ L = mvr \end{array} \right\}$$

$$mvr = n\hbar$$

$$v = \frac{n\hbar}{mr}$$

# O Modelo de Bohr – raio e velocidade

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{Ze^2 m} \rightarrow a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \quad \text{Raio de Bohr} = 0,529 \text{ \AA}$$

$$r_n = \frac{n^2 a_0}{Z}$$

$$v_n = \frac{n\hbar}{mr} = \frac{n\hbar}{m} \frac{Ze^2 m}{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}$$

$$v_n = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 n\hbar}$$

H=1, Z=1, n=1  
 $r_1 = 0,05 \text{ nm}$   
 $v_1 \sim 2,2 \times 10^6 \text{ m/s}$

Raio atômico é quantizado

## Energia quantizada

$$E_0 = -\frac{1}{2} \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{e^4 m}{\hbar^2}$$

O estado de energia mais baixo:

$$E_n = -E_0 \frac{Z^2}{n^2}$$

$$E_0 = -13,6 \text{ eV}$$

$$n=1 \quad E_1 = E_0$$

menor raio

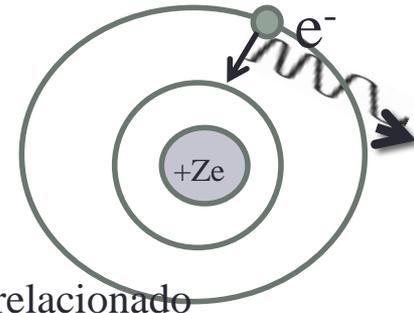
# Modelo de Bohr

- A frequência da radiação emitida esta relacionada às energias das órbitas:

$$E_n = -E_0 \frac{Z^2}{n^2}$$

$$h\nu = E_{ni} - E_{nf}$$

Para o átomo de H: espectro esta relacionado

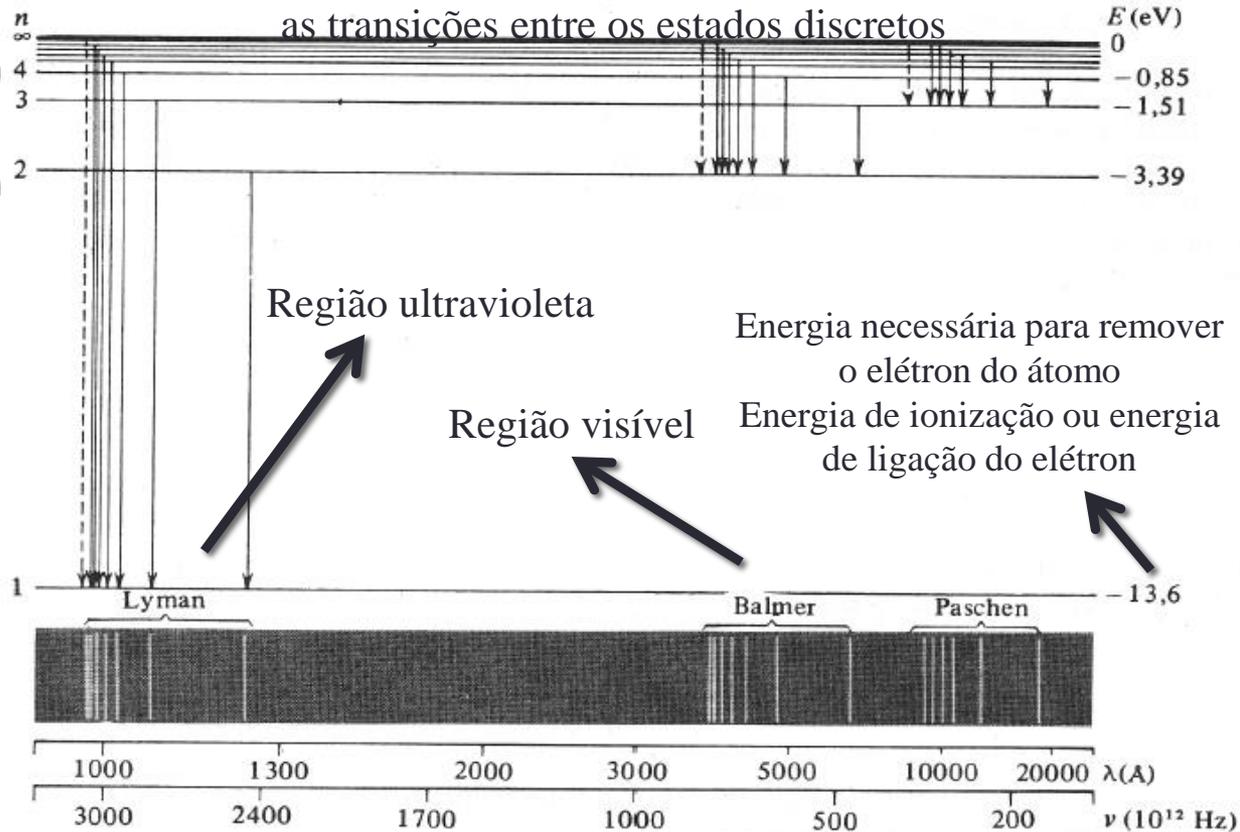


$$h\nu = -E_0 \frac{Z^2}{n_i^2} - \left( -E_0 \frac{Z^2}{n_f^2} \right)$$

$$\nu = \frac{E_0 Z^2}{h} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

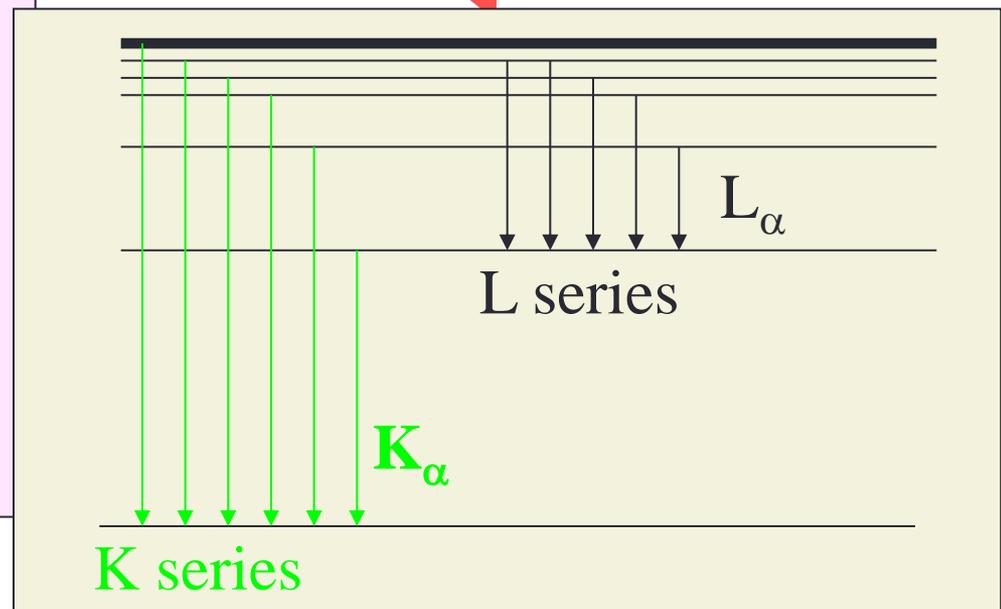
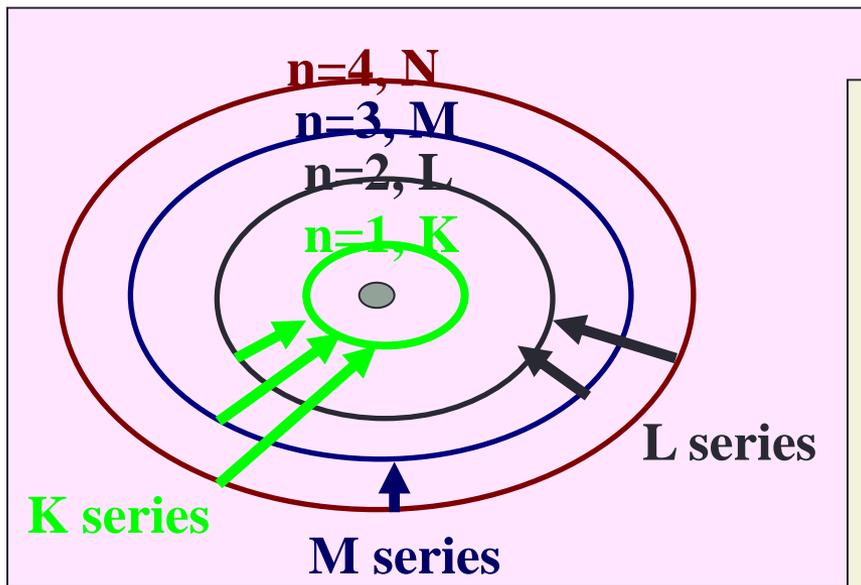
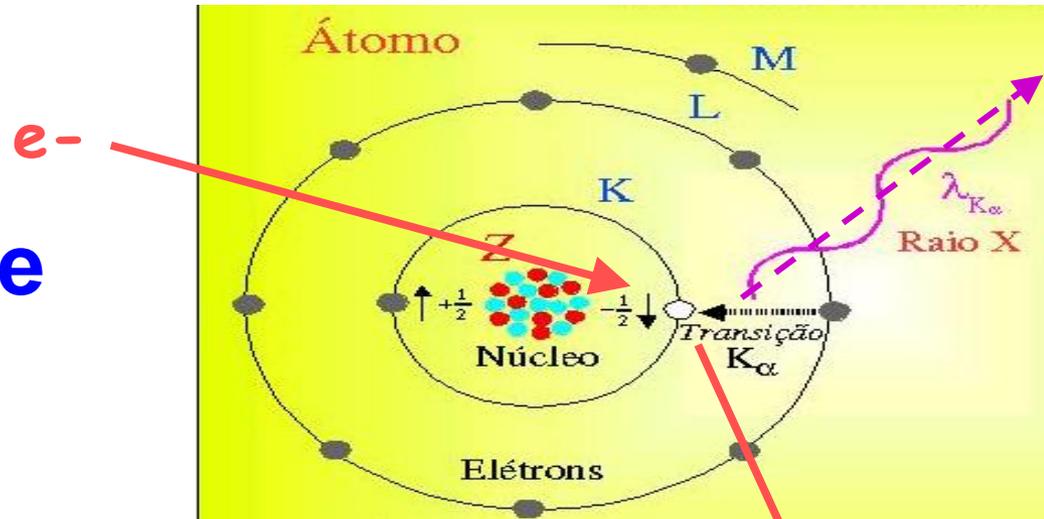
$$\frac{1}{\lambda} = \frac{E_0 Z^2}{hc} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

Valor teórico obtido por Bohr para a constante de Rydberg  
Calculou  $R=1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$



# Ionização e De-excitação

## Emissão de Raio-X



# Estados de energia do átomo

- O modelo de Bohr prevê que a energia total de um elétron em um átomo é quantizada
- A teoria de Planck da radiação de corpo negro também previa que no processo de emissão e absorção de radiação, os átomos nas paredes da cavidade se comportavam como se tivessem estados de energia quantizados.



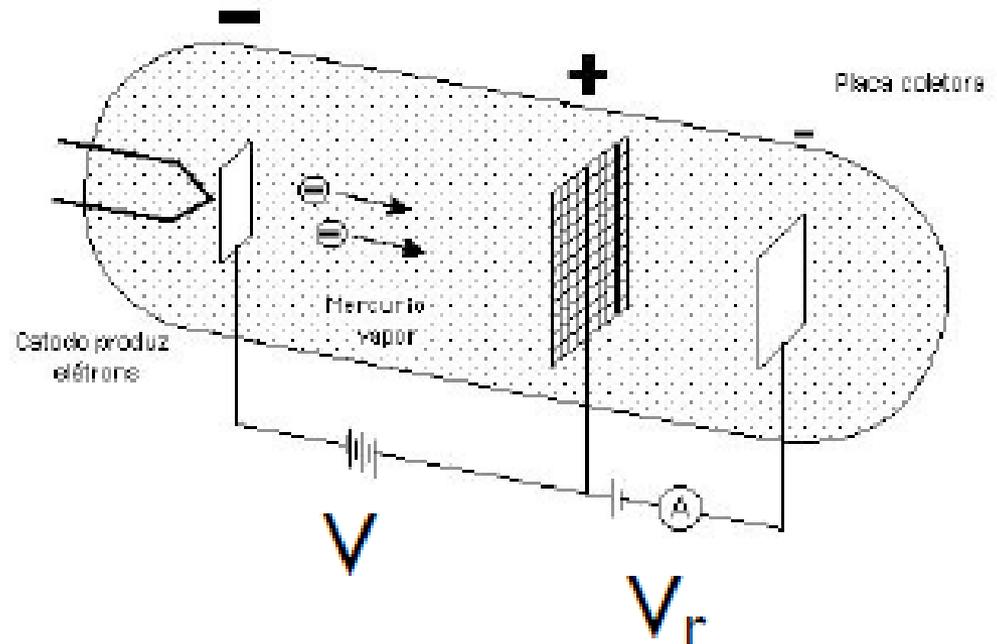
- Portanto cada átomo pode ter certos estados de energia, separados de forma discreta



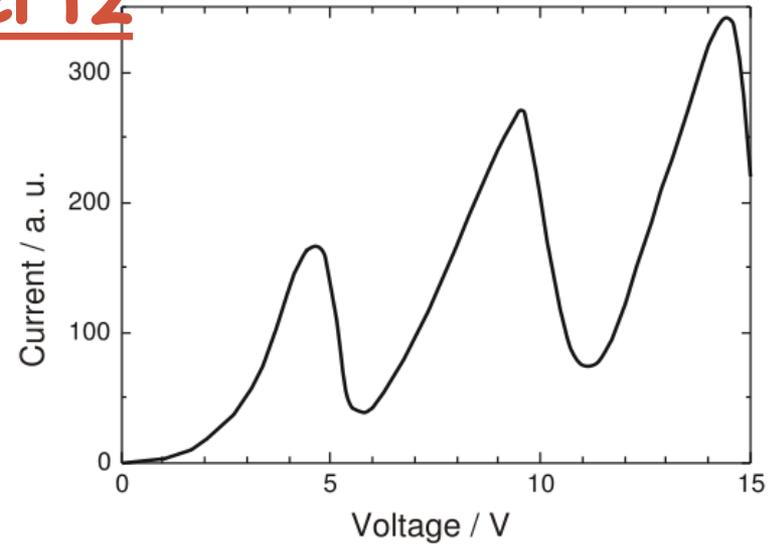
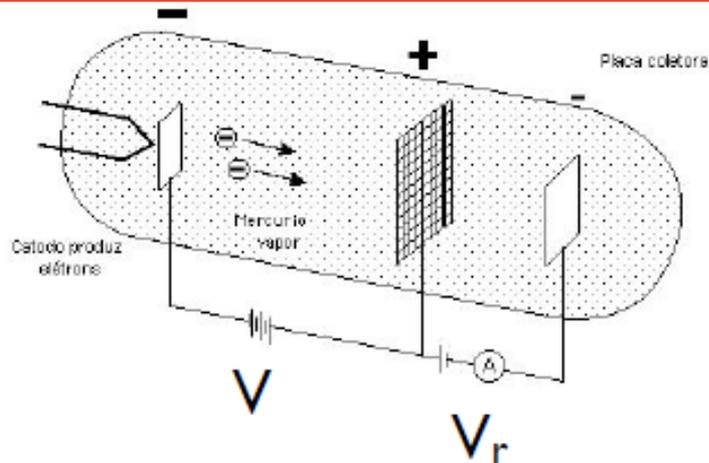
- Franck e Hertz em 1914 realizaram um experimento que confirmou a hipótese de Bohr que os estados de energia interna de um átomo são quantizados.

# Experimento de Frank - Hertz

- Ampola de vidro com gás a baixa pressão (gás de átomos para investigar).
- Catodo aquecido que produz elétrons.
- Elétrons são acelerados por um potencial  $V$  e atraídos pela grade polarizada positiva.
- Os elétrons que passam pela grade só chegam a placa P se tiverem energia suficiente para vencer o potencial retardador  $V_r$ .

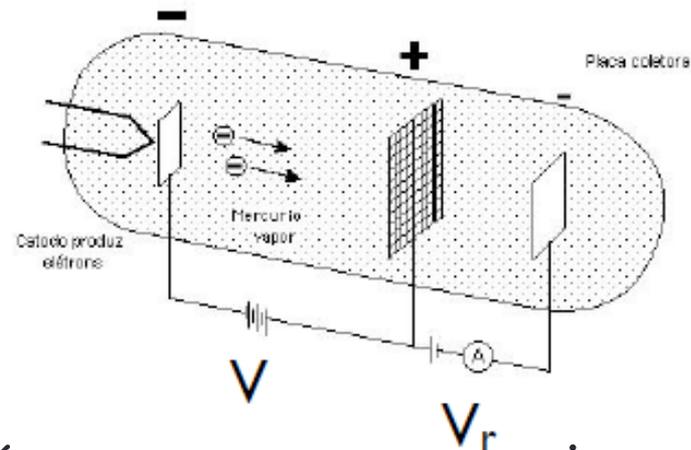
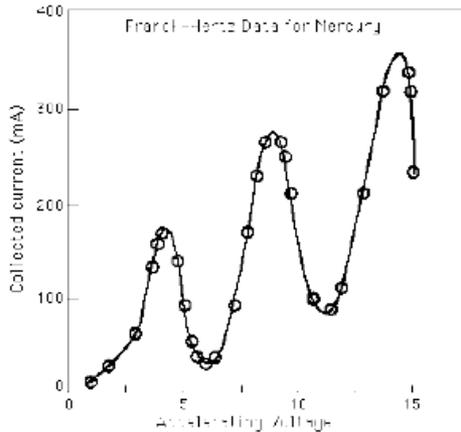


# Experimento de Franck - Hertz



- Os elétrons acelerados pela tensão  $V$  que colidem com os elétrons dos átomos do gás não podem transferir energia para esses elétrons a menos que tenham adquirido energia cinética  
 $eV = E_2 - E_1 = 4,9eV$  (gráfico mostra primeiro pico).
- Assim, qualquer colisão entre um elétron incidente com energia menor que  $4,9eV$  e um elétron do gás será elástica: a energia cinética do elétron incidente será a mesma após a colisão e portanto este elétron vencerá o potencia retardador e chegará a placa.
- Se  $eV \geq 4,9eV$ , o elétron incidente poderá transferir  $4,9eV$  ao elétron do gás (fazer o elétron ir para o estado excitado), o espalhamento é inelástico e o elétron perde toda a sua energia e não consegue vencer o potencia  $V_r$  e a corrente cai.

# Experimento de Franck - Hertz



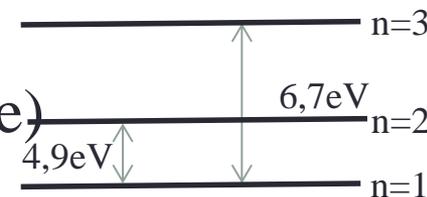
- Uma parcela significativa dos elétrons com esta energia excita os átomos de Hg e ao fazê-lo perdem sua energia cinética
- Se  $V$  for apenas ligeiramente superior a 4,9V o processo de excitação deve ocorrer exatamente em frente a grade.
- Após este processo os elétrons não conseguem ganhar energia cinética suficiente para superar o potencial retardador e atingir a placa.
- Para  $V$  um pouco maior os elétrons podem ganhar energia cinética após o processo de excitação e atingir a placa

# Experimento de Franck - Hertz

- Significa que o primeiro estado excitado do Hg tem energia 4,9 eV acima do estado fundamental

$$\frac{hc}{\lambda} = 4,9 \quad \lambda = 2536\text{\AA} = 253,6\text{nm}$$

- Experimentalmente temos uma linha espectral do mercúrio com este comprimento de onda
- Novas quedas de corrente indicam a promoção dos elétrons do estado fundamental para outros níveis de energia excitados ou
- Excitações múltiplas causadas pelo mesmo elétron  $2 \times 4,9 = 9,8\text{V}$  (metade do caminho até a grade)



- Este experimento forneceu evidências da quantização de energia dos átomos
- Na configuração usual apenas as excitações múltiplas para o primeiro estado excitado são observadas, de modo que as quedas de corrente acontecem a cada 4,9V

# Limitações do modelo de Bohr

**O modelo de Bohr foi o primeiro passo para entendermos a estrutura do átomo**

**O modelo mostra algumas deficiências**

- Medidas de comprimento de onda para o espectro atômico do hidrogênio são precisas mas exibem pequenos desacordos com os resultados do modelo de Bohr (podem ser corrigidos usando a massa reduzida (M massa do núcleo)  
$$\mu_e = \frac{m_e M}{m_e + M}$$
- Como interpretar fisicamente a quantização do momento angular
- Não é capaz de explicar as intensidades e as aberturas das linhas
- O modelo também não é capaz de explicar a ligação dos átomos para formar as moléculas

# Limitações do modelo de Bohr

- O modelo de Bohr pode ser aplicado a qualquer átomo de elétron único (como H), e átomos ionizados como  $\text{He}^+$  e  $\text{Li}^{++}$ .
- A única mudança necessária é o cálculo da força Coulombiana onde  $e^2$  é substituído por  $(Ze)^2$  para levar em conta a carga nuclear de  $+Ze$ .

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{E_0 Z^2}{hc} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad \text{ou} \quad E_n = -\frac{E_0 Z^2}{n^2}$$

## Exemplo

- O modelo de Hélio tem 2 elétrons orbitando em torno de núcleo de carga  $2e$ . Já que os elétrons interagem com o núcleo mas também com cada um, este átomo não pode ser tratado com a teoria simples de Bohr. No entanto se o átomo perder um de seus elétrons por ionização, o átomo agora terá apenas um elétron orbitando em torno do núcleo, neste caso a teoria de Bohr pode ser aplicada. Quais são as energia dos estados estacionários deste átomo de hélio ionizado?

$$E_n = -\frac{E_0 Z^2}{n^2} = -\frac{4 \times 13,6 \text{ eV}}{n^2} = -\frac{54,4 \text{ eV}}{n^2}$$

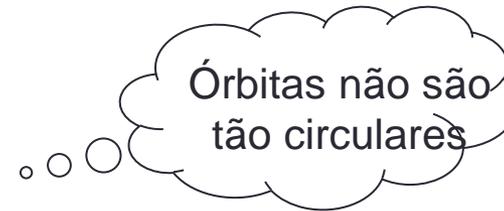
# Limitações do modelo de Bohr

## **O modelo ainda mostra algumas deficiências**

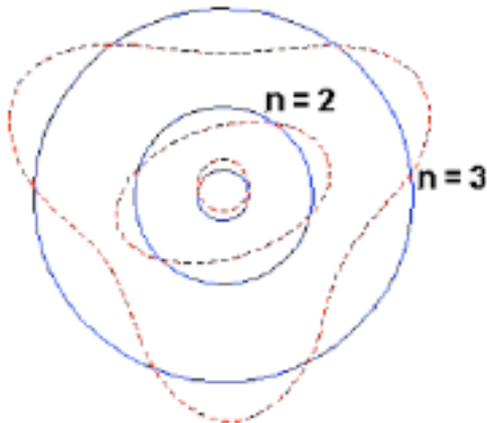
- Com o aumento das precisões dos espectrógrafos óticos foi observado que cada linha (originalmente dita como simples) poderia possuir 2 ou mais linhas... (grupos de linhas muito próximas com mesma comprimento de onda).
- Arnold Sommerfeld adaptou a teoria da relatividade para as hipóteses de Bohr e foi capaz de levar em conta algumas das aberturas das linhas dos espectros medidos.
- Trabalhou com órbitas elípticas - regras de quantização de Wilson e Sommerfeld

# Quantização de Bohr

- Vamos re-olhar o modelo de Bohr e reinterpretá-lo



- A quantização do momento angular pode ser visto como consequência do elétron se comportar como uma onda estacionária



# Regras de quantização de Wilson e Sommerfeld

- Em 1916, Wilson e Sommerfeld enunciaram um conjunto de regra de quantização:
- “Para qualquer sistema físico no qual as coordenadas são funções periódica do tempo existe uma condição quântica para cada coordenada”

$$\oint P_q dq = n_q h$$

$q$  é uma coordenada,  $p_q$  é o momento associado a esta coordenada e ,

$n_q$  é o número quântico que toma apenas valores inteiros.

$\oint$  significa que a integração é tomada sobre um período da coordenada  $q$ .

# Regras de quantização de Wilson e Sommerfeld

$$\oint P_q dq = n_q h$$

## Exemplo: átomo de Hidrogênio

Um elétron se movendo em uma órbita de raio  $r$  tem momento angular constante

$$L = mvr$$

A coordenada  $\theta$  é uma função periódica do tempo (0 a  $2\pi$ )

$$\oint L d\theta = nh$$

$$L \int_0^{2\pi} d\theta = nh$$

$$L2\pi = nh \Rightarrow L = n\hbar$$



Lei de quantização de Bohr

# Regras de quantização de Wilson e Sommerfeld

- Uma interpretação física da regra de quantização de Bohr foi dada em 1924

por de Broglie

$$L = mvr = n\hbar$$

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

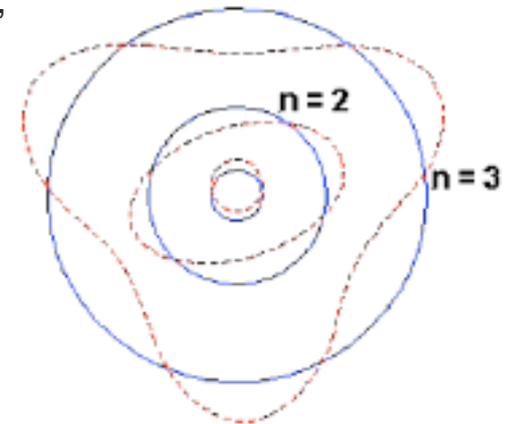
Nova ideia, atribuir uma onda para a partícula

$$pr = \frac{nh}{2\pi}$$

Momento do elétron em uma órbita possível de raio  $r$ ,

$$\frac{h}{\lambda} r = \frac{nh}{2\pi}$$

$$2\pi r = n\lambda$$

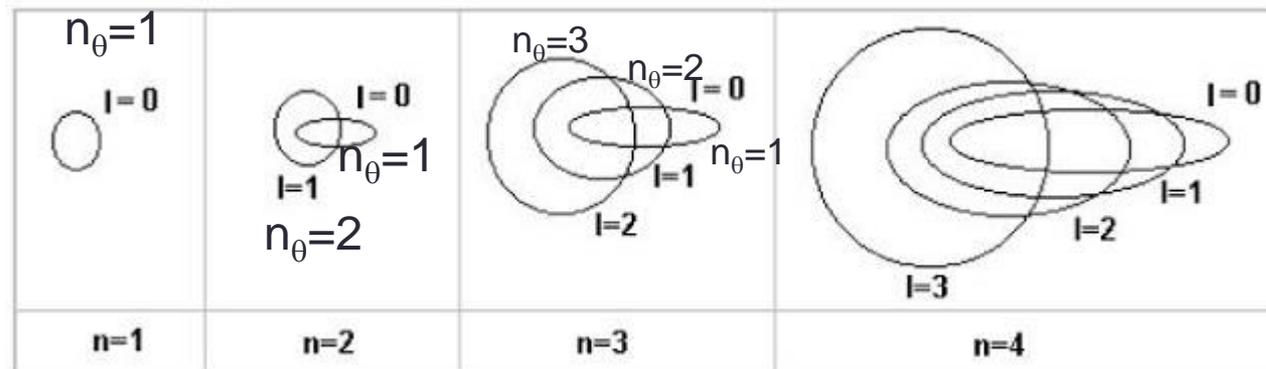


As órbitas possíveis são aquelas nas quais as circunferências podem conter exatamente um número inteiro de comprimentos de onda de de Broglie

Sommerfeld trabalhou com órbitas elípticas para o átomo de H e também levou em conta as correções relativísticas para a energia do elétron. Usou isto como tentativa de explicar a estrutura fina do hidrogênio (**Estrutura fina é uma separação das linhas espectrais em várias componentes diferentes**).

# Órbitas elípticas de Sommerfeld

Órbitas elípticas para o átomo de H. Classicamente sabemos que órbitas circulares e elípticas com o mesmo eixo maior tem a mesma energia. No entanto as correções relativísticas para a energia cinética nos dá pequenas diferenças entre as energias das órbitas circulares e elípticas.



A cada valor do número quântico principal  $n$  há  $n$  diferentes órbitas possíveis

$$E = E_1$$

$$E = E_2$$

$$E = E_3$$

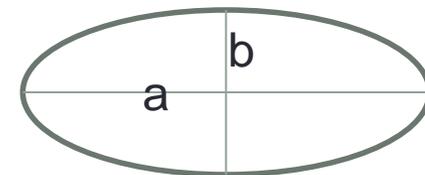
$$E = E_4$$

Número quântico azimutal

Usou coordenadas polares

$$\oint L d\theta = n_\theta h$$

$$\oint P_r dr = n_r h$$



As várias órbitas caracterizadas por um mesmo valor de  $n$  são ditas degeneradas

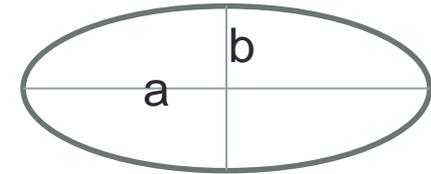
# Órbitas elípticas de Sommerfeld

Usou coordenadas polares

$$\oint L d\theta = n_{\theta} h$$

$$\oint P_r dr = n_r h$$

Número quântico  
azimutal



As várias órbitas caracterizadas por um mesmo valor de  $n$  são ditas degeneradas

1) A primeira condição dá a mesma restrição para o momento angular orbital

$$L = n_{\theta} \hbar \quad n_{\theta} = 1, 2, 3, \dots$$

Que era obtida para a teoria da órbita circular

2) A segunda condição (que não era aplicável a órbita puramente circular)

$$L(a/b - 1) = n_r \hbar \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Que era obtida para a teoria da órbita circular

# Órbitas elípticas de Sommerfeld

Sommerfeld calculou os valores dos semi-eixos maior (a) e menor (b) que dão a forma e o tamanho das órbitas elípticas e a energia total E do elétron nessa órbita

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{\mu Z e^2}$$

$$b = a \frac{n_\theta}{n}$$

$$E = - \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu Z^2 e^4}{2n\hbar^2}$$

$\mu$  é a massa reduzida  
n é o número quântico:

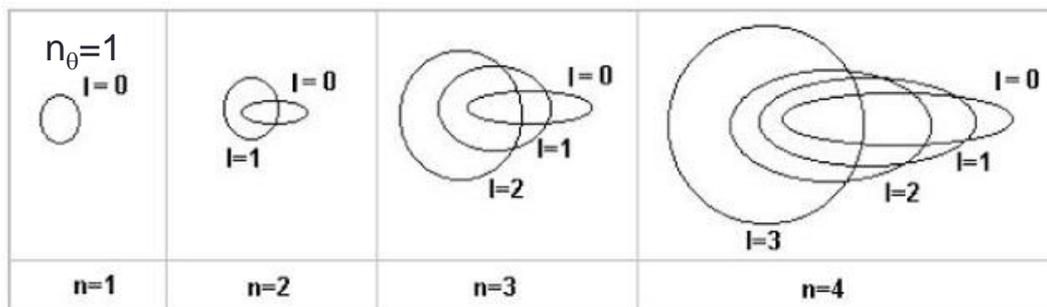
$$n \equiv n_\theta + n_r$$

$$n_\theta = 1, 2, 3, \dots$$

$$n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$$

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

As energias são degeneradas

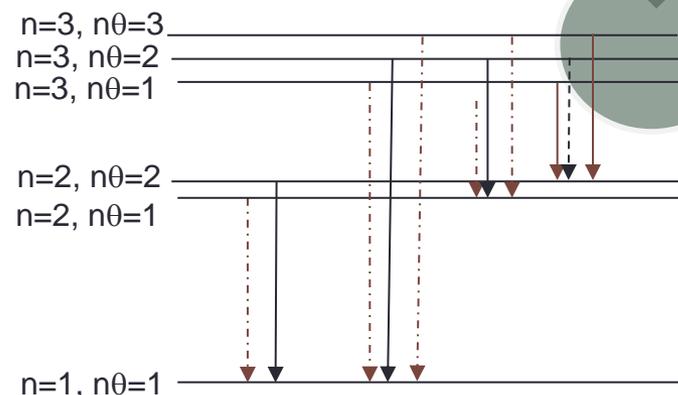


$$E = E_1$$

$$E = E_2$$

$$E = E_3$$

$$E = E_4$$



# Órbitas elípticas de Sommerfeld tratadas relativisticamente

O tamanho real da correção depende da velocidade média do elétron que por sua vez depende da excentricidade da órbita, correções da ordem de  $v^2/c^2$ , era provável que a maior correção fosse na órbita muito excêntrica, porque  $v$  aumenta à medida que o elétron se aproxima do núcleo

$$v = \frac{n\hbar}{mr} = \frac{\hbar}{mr} \quad (n=1)$$

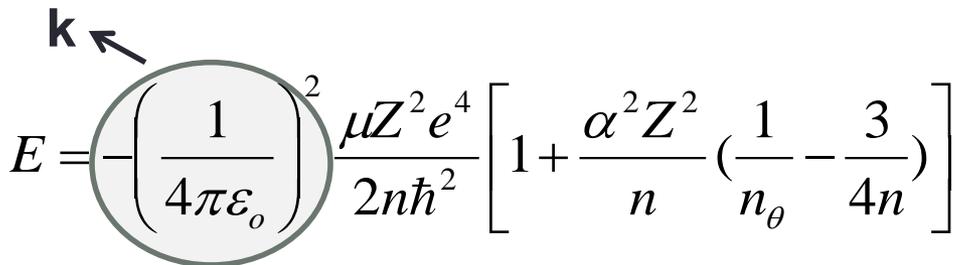
$$r_1 = a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar^2}{mke^2}$$

$$v = \frac{\hbar}{mr_1} = \frac{\hbar}{m\left(\frac{\hbar^2}{mke^2}\right)} = \frac{ke^2}{\hbar}$$

$$\frac{v}{c} = \frac{ke^2}{\hbar c} = \frac{1,44\text{ev.nm}}{197,3\text{ev.nm}}$$

As linhas tracejadas não foram observadas nos espectros e estas transições não ocorrem (regras de seleção):

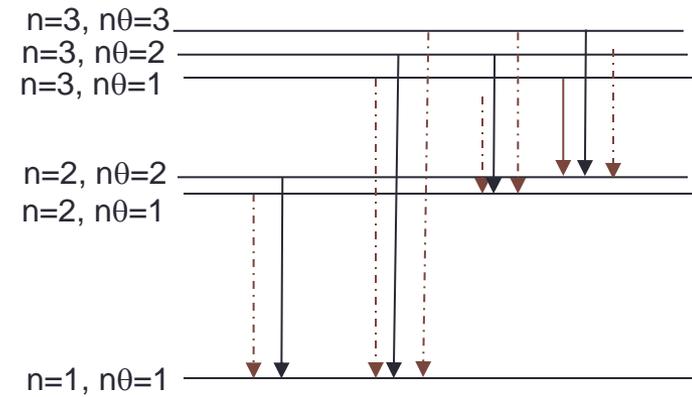
$$n_{\theta_i} - n_{\theta_f} = \pm 1$$



$$E = -\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{\mu Z^2 e^4}{2n\hbar^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left( \frac{1}{n_\theta} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

$\alpha$  é chamada de “constante de estrutura fina”

$$\alpha = \frac{ke^2}{\hbar c} \cong \frac{1}{137}$$



# Princípio da correspondência

Bohr, 1923:

1. As previsões da teoria quântica para o comportamento de qualquer sistema físico devem corresponder às previsões da teoria clássica no limite no qual os números quânticos que especificam o estado se tornam muito grandes.
2. Uma regra de seleção é válida para todos os números quânticos possíveis. Portanto, todas as regras que são necessárias para obter a correspondência ao limite clássico ( $n$  grande) também se aplicam no limite quântico ( $n$  pequeno).

Ver Ex. 4-11 (Eisberg, pág. 159).

## Críticas à velha Mecânica Quântica

1. Teoria só trata sistemas periódicos;
2. Não determina as probabilidades de transição;
3. Só funciona para átomos monoelétrônicos;

# Conteúdo P1

- **Panorama da Física no final do século XIX**
- **Natureza Ondulatória da Radiação eletromagnética**
  - Radiação Térmica – Hipótese de Planck
- **Dualidade onda – partícula: Radiação eletromagnética e as propriedades corpusculares**
  - Efeito fotoelétrico
  - Efeito Compton
  - Produção e aniquilação de pares
  - ~~Difração de raios- $\lambda$~~
- **Dualidade onda – partícula: Matéria e as propriedades corpusculares**
  - Natureza atômica da matéria
  - Modelo de Thomson
  - Modelo de Rutherford
  - Modelo de Bohr
  - Modelo de Sommerfeld – FranckHertz
- **Dualidade onda – partícula: Matéria e as propriedades ondulatórias**
  - Postulado de de Broglie
  - Difração de elétrons,
  - Difração de Bragg
  - Princípios de incerteza
- **Teoria de Schroedinger da Mecânica Quântica**
  - Equação de Schroedinger – equação de onda para o elétron
  - Autofunções e autovalores
  - Valores esperados
  - Potenciais nulo, degrau e poço quadrado
- **Átomo de Hidrogênio**

# BIBLIOGRAFIA

1) Física Quântica, Eisberg e Resnick (ER);

Capítulo 1, 2 e 4

2) Modern Physics for scientists and engineers, T. Thornton e Andrew Rex (TR);

Capítulo 1, 3 e 4

3) Modern Physics de Serway, Moses e Moyer (SMM);

Capítulo 3 e 4

4) Física Moderna, Paul A. Tipler e Ralph A. Liewellyn (TL);

Capítulo 2 (2.3 – 2.4) 3 e 4

5) Notas de aula do Professor Roberto V. Ribas (RR)

Capítulo 1,2, 3 e 4

6) Modern Physics, Kenneth Krane (KK)

Capítulo 3 e 6

7) Física Moderna, Francisco Caruso e Vitor Oguri (FV)

Capítulo 2, 4, 7, 8, 10, 11 e 12 (partes destes capítulos)