

Aula 14: Física Quântica

Bárbara Amaral
Instituto de Física da USP

MODELOS ATÔMICOS

(não divisível)
Átomo
↑
Demócrito e
(430a.C.) Leucipo
↑
Não foi
modelo
atômico

Indivisível, indestrutível,
neutro, esférico, maciço

Modelo da Bola
de Bilhar
Dalton
(1808)

Descoberta
do próton
Goldstein
(1886)

Descoberta
do elétron
↑
Modelo do
pudim de
passas
J.J. Thompson
(1897)
↑
Tubo de
Crookes

(1911)
Rutherford



(denso)
maior parte da massa

- Elétrons giram em
torno do núcleo

(1913)
Bohr



Estudo das camadas
eletrônicas

↳ Camadas de energia

↳ Ganho de e^-
perda de e^-



* Os elétrons giram em
trajetória circular, c/ certa
quantidade de energia (quantum)

(1913)
Sommerfeld

Estudo dos subníveis
energéticos
s, p, d, f

O núcleo do átomo

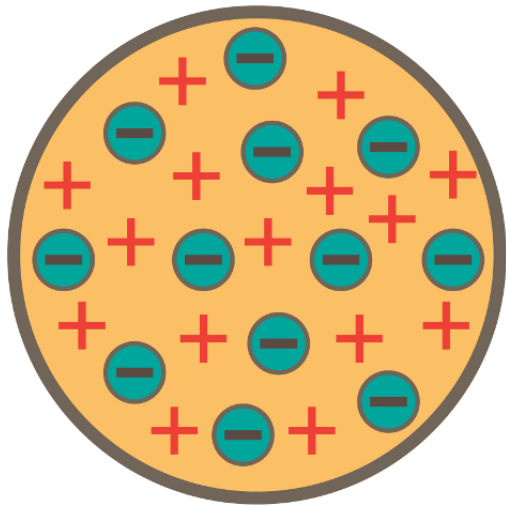
Ideia do que existe no interior do átomo.

Podemos descrever como a massa e a carga se distribuem pelo volume do átomo.

Experimento de Thomson

Experimento de Thomson

Descobriu o elétron e determinou a razão $\frac{e}{m}$.



Experimento de Milikan

Determinou a carga e a massa do elétron.

Experimento de Rutherford

Experimento de Rutherford

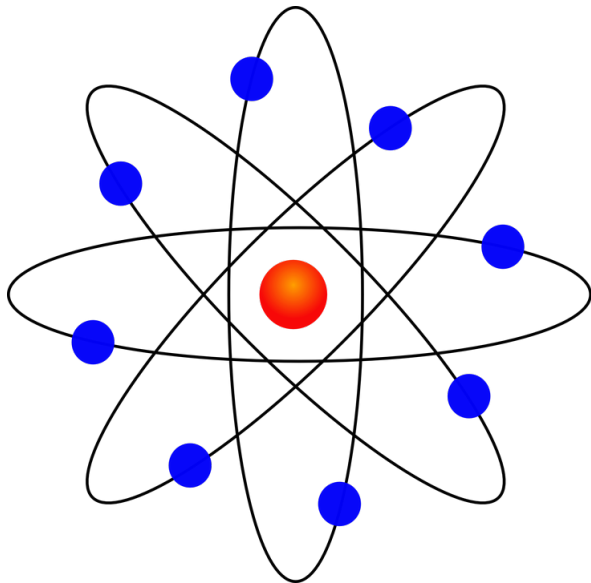
Mostrou que as cargas negativas e positivas **não** estão uniformemente pelo volume do átomo.

No modelo de pudim de passas de Thomson as cargas positivas e negativas estão uniformemente distribuídas pelo átomo.

O campo elétrico atuando em uma partícula α que passa dentro do átomo deveria ser fraco. O desvio máximo deveria ser de apenas alguns graus.

A carga positiva deve estar concentrada em uma região bem menor, chamada **núcleo**.

O modelo de Rutherford



O que poderia manter um elétron a uma certa distância do núcleo apesar da atração mútua?

Rutherford sugeriu que os elétrons deveriam descrever órbitas circulares ao redor do núcleo.

O elétron deveria emitir radiação eletromagnética, perdendo energia e descrevendo uma órbita espiral em direção ao núcleo.

À medida que os elétrons irradiam energia, suas velocidades angulares variam continuamente e eles deveriam emitir um espectro contínuo.

O espectro atômico de linhas e níveis de energia

Cada elemento em sua forma gasosa possui em espectro de linhas que caracteriza esse elemento.

O espectro de linhas está relacionado à estrutura interna dos átomos.

Não é possível explicar o espectro de linhas através da física clássica.

A origem do **espectro de linhas** pode ser entendido a partir dos conceitos de **fótons** e **níveis de energia** do átomo.

O espectro de linhas de um elemento consiste de fótons com energias específicas que são emitidos por seus átomos.

Com a emissão, a energia do átomo varia de uma quantidade igual à energia do fóton.

Hipótese de quantização

Cada átomo possui um conjunto discreto de níveis de energia permitidos.

Um átomo pode fazer uma **transição** de um nível de energia para outro, emitindo ou absorvendo um fóton com energia igual à diferença de energia entre esses níveis.

Se um átomo passa de um nível de energia maior para um nível de energia menor ele **emite** um fóton de energia igual

$$hf = E_i - E_f.$$

Se um átomo passa de um nível de energia menor para um nível de energia maior ele **absorve** um fóton de energia igual

$$hf = E_f - E_i.$$

O espectro do átomo de hidrogênio

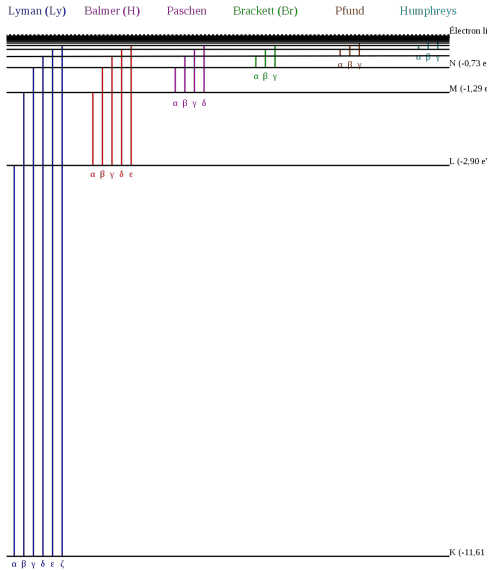
O espectro de linhas do hidrogênio havia sido
exaustivamente estudado experimentalmente.

Analizando os dados experimentais, foram encontradas fórmulas que forneciam o comprimento de onda de um conjunto de linhas do espectro.

Todas essas séries podem ser explicadas utilizando a quantização dos níveis de energia do hidrogênio e a relação entre as transições de um nível de energia para outro e a frequência dos fótons emitidos.

Além disso, essas séries sugerem que

$$E_n = \frac{-hcR}{n^2}$$



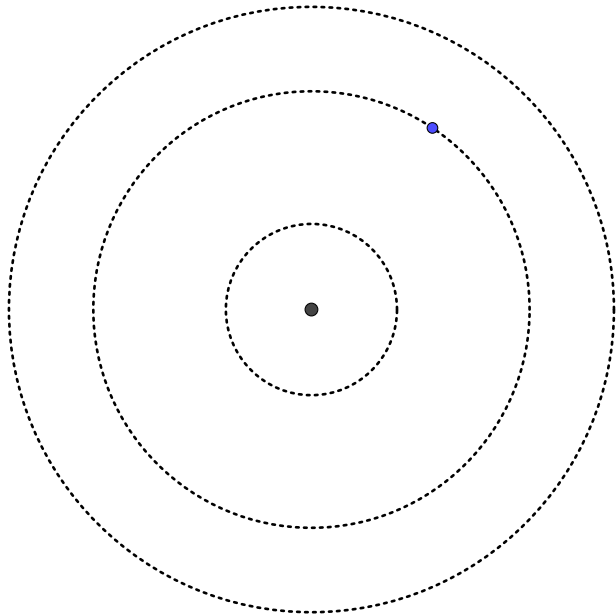
O modelo de Bohr

Bohr postulou que um elétron em um átomo pode circular ao redor do núcleo em **órbitas estacionárias**, sem emitir nenhuma energia.

Existe uma energia definida associada a cada órbita e o átomo só emite energia ao fazer uma transição de um nível de energia para outro.

Hipótese de quantização

Cada átomo possui um conjunto discreto de níveis de energia permitidos.

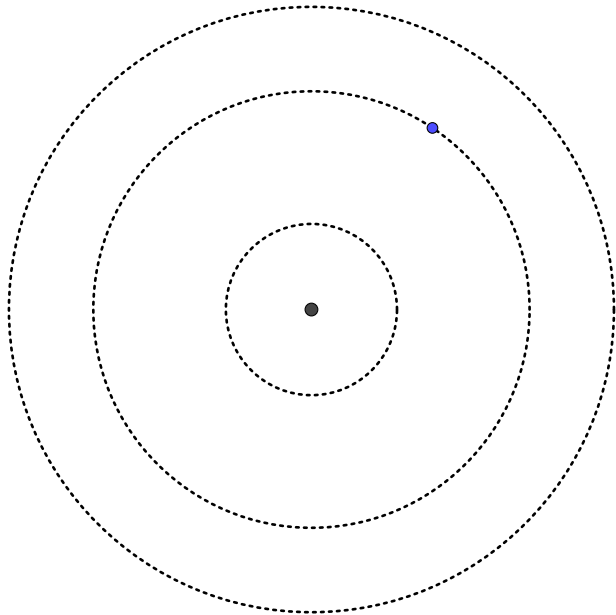


Relacionando a frequência da luz emitida às velocidades angulares dos elétrons, Bohr verificou que o **momento angular** dos elétrons deve ser **quantizado**.

Quantização do momento angular

$$L = n\hbar$$

O modelo de Bohr para o átomo de hidrogênio



$$r_n = \frac{\epsilon_0 n^2 h^2}{m \pi e^2}$$

Raio de Bohr

$$a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{m \pi e^2}$$

$$v_n = \frac{e^2}{2\epsilon_0 n h}$$

Níveis de energia

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

Dos dados experimentais

$$E_n = -\frac{hcR}{n^2}$$

Dos dados experimentais

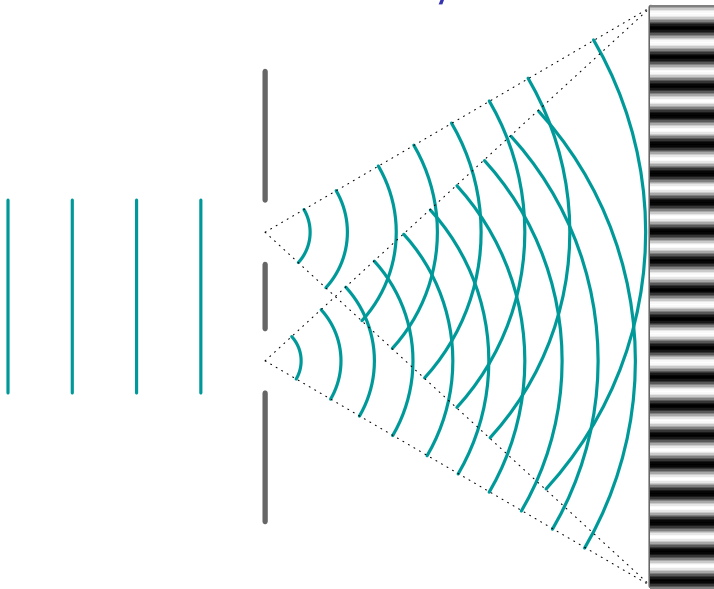
$$R = -\frac{me^2}{8\epsilon_0^2 n^2 h^3 c}$$

A dualidade onda-partícula

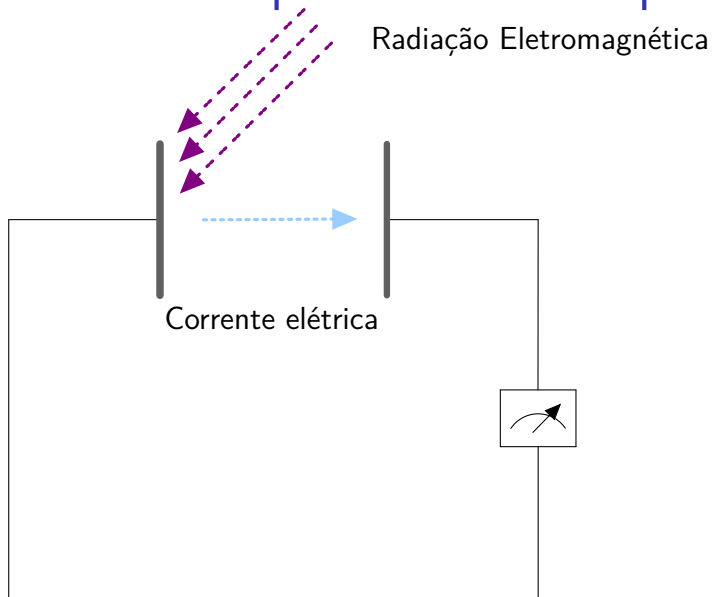
Dualidade onda-partícula

A radiação eletromagnética algumas vezes se comporta como onda e algumas vezes se comporta como partícula.

Interferência e difração



Efeito fotoelétrico e espalhamento Compton



Princípio da complementaridade

É necessário usar o modelo ondulatório juntamente com o modelo corpuscular para termos uma descrição completa da natureza.

De Broglie

Se a natureza é simétrica, essa dualidade também deveria ser válida para a matéria.

Se uma partícula se comporta como uma onda, ela deve possuir um **comprimento de onda** e uma **frequência**.

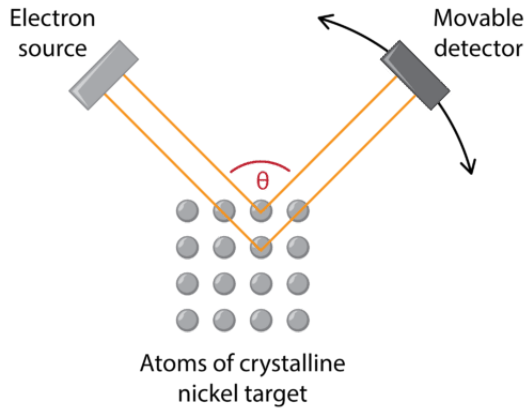
De Broglie postulou que uma partícula livre de massa m deslocando-se com velocidade não relativística v deve possuir comprimento de onda:

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

A frequência está relacionada à energia:

$$E = hf$$

Confirmação experimental da hipótese de De Broglie



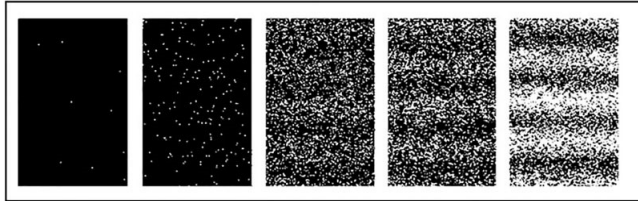
Feixes de elétrons são difratados ao passarem por um cristal.

Interferência construtiva

$$d \sin(\theta) = n$$

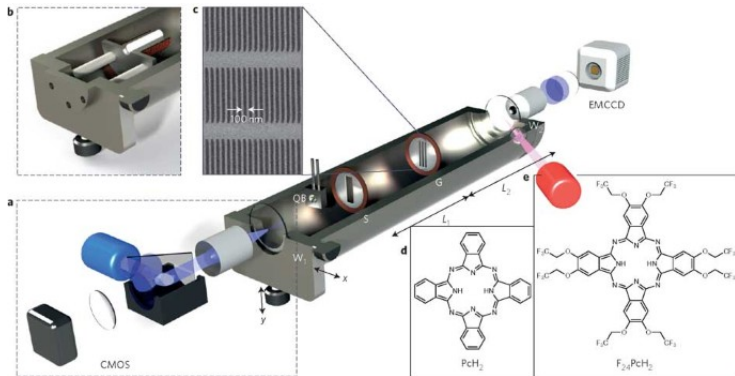
Os valores observados concordam com essa expressão se usamos o comprimento de onda de De Broglie.

Experimento da fenda dupla com elétrons



Experimento da fenda dupla com ftalocianina

$C_{32}H_{18}N_8$



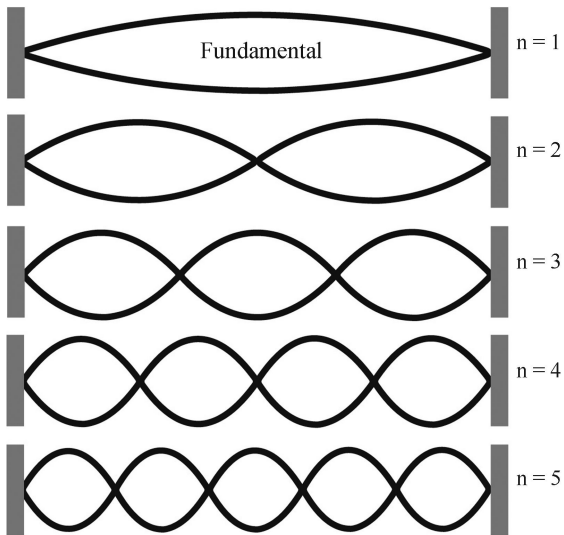
Princípio da complementaridade

É necessário usar o modelo ondulatório juntamente com o modelo corpuscular para termos uma descrição completa da natureza.

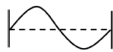
O modelo de Bohr e as ondas de De Broglie

Descrevemos os elétrons através de uma função de onda.

O elétron é descrito por uma onda estacionária distribuída ao longo de uma órbita circular.



$n=1$



$n=2$



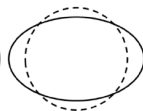
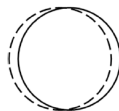
$n=3$



$n=4$



$n=5$



Para uma órbita circular de raio r temos:

Para uma órbita circular de raio r temos:

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

Para uma órbita circular de raio r temos:

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

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

Ondas De Broglie

A hipótese sugerida por De Broglie foi o início de uma revolução que levou ao desenvolvimento da **física quântica**.

Revisão radical sobre nossos conceitos sobre a estrutura da matéria.

O que a onda associada a uma partícula representa?

Uma partícula não é um ponto geométrico, mas uma entidade que ocupa uma região do espaço.

A distribuição espacial de uma partícula é descrita por uma função chamada de **função de onda**.

A **função de onda** está relacionada à probabilidade de encontrar a partícula em uma região do espaço.

Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen.

Von W. Heisenberg in Göttingen.

(Eingegangen am 29. Juli 1926.)

In der Arbeit soll versucht werden, Grundlagen zu gewinnen für eine quantentheoretische Mechanik, die ausschließlich auf Beziehungen zwischen prinzipiell beobachtbaren Größen basiert ist.

Bekanntlich läßt sich gegen die formalen Regeln, die allgemein in der Quantentheorie zur Berechnung beobachtbarer Größen (z. B. der Energie im Wasserstoffatom) benutzt werden, der schwerwiegende Einwand erheben, daß jene Rechenregeln als wesentlichen Bestandteil Beziehungen enthalten zwischen Größen, die scheinbar prinzipiell nicht beobachtet werden können (wie z. B. Ort, Umlaufzeit des Elektrons), daß also jenen Regeln offenbar jedes anschauliche physikalische Fundament mangelt, wenn man nicht immer noch an der Hoffnung festhalten will, daß jene bis jetzt unbeobachtbaren Größen später vielleicht experimentell zugänglich gemacht werden könnten. Diese Hoffnung könnte als berechtigt angesehen werden, wenn die genannten Regeln in sich konsequent und auf einen bestimmt umgrenzten Bereich quantentheoretischer Probleme anwendbar wären. Die Erfahrung zeigt aber, daß sich nur das Wasserstoffatom und der Starkereffekt dieses Atoms jenen formalen Regeln der Quantentheorie fügen, daß aber schon beim Problem der „gekreuzten Felder“ (Wasserstoffatom in elektrischem und magnetischem Feld verschiedener Richtung) fundamentale Schwierigkeiten auftreten, daß die Reaktion der Atome auf periodisch wechselnde Felder sicherlich nicht durch die genannten Regeln beschrieben werden kann, und daß schließlich eine Ausdehnung der Quantenregeln auf die Behandlung der Atome mit mehreren Elektronen sich als unmöglich erwiesen hat. Es ist üblich geworden, dieses Versagen der quantentheoretischen Regeln, die ja wesentlich durch die Anwendung der klassischen Mechanik charakterisiert waren, als Abweichung von der klassischen Mechanik zu bezeichnen. Diese Bezeichnung kann aber wohl kaum als sinngemäß angesehen werden, wenn man bedenkt, daß schon die (ja ganz allgemein gültige) Einstein-Bohrsche Frequenzbedingung eine so völlige Absage an die klassische Mechanik oder besser, vom Standpunkt der Wellentheorie aus, an die dieser Mechanik zugrunde liegende Kinematik darstellt, daß auch bei den einfachsten quantentheoretischen Problemen an

THE
PHYSICAL REVIEW

AN UNDULATORY THEORY OF THE MECHANICS
OF ATOMS AND MOLECULES

BY E. SCHRÖDINGER

ABSTRACT

The paper gives an account of the author's work on a new form of quantum theory. §1. The Hamiltonian analogy between mechanics and optics. §2. The analogy is to be extended to include real "physical" or "undulatory" mechanics instead of mere geometrical mechanics. §3. The significance of wave-length; macro-mechanical and micro-mechanical problems. §4. The wave-equation and its application to the hydrogen atom. §5. The intrinsic reason for the appearance of discrete characteristic frequencies. §6. Other problems; intensity of emitted light. §7. The wave-equation derived from a Hamiltonian variation-principle; generalization to an arbitrary conservative system. §8. The wave-function physically means and determines a continuous distribution of electric-ity in space, the fluctuations of which determine the radiation by the laws of ordinary electrodynamics. §9. Non-conservative systems. Theory of dispersion and scattering and of the "transitions" between the "stationary states." §10. The question of relativity and the action of a magnetic field. Incomplete-ness of that part of the theory.

A função de onda

Em escalas atômicas e subatômicas, uma partícula não pode ser tratada como um ponto.

Descrevemos uma **função de onda** para descrever o estado da partícula:

$$\Psi(x, y, z, t)$$

A partir dessa função de onda podemos encontrar previsões **probabilísticas** sobre o comportamento da partícula.

A física quântica é probabilística *a priori*.

Interpretação da função de onda

A função de onda descreve a **distribuição de probabilidade** de uma partícula no espaço.

$$|\Psi(x, y, z, t)|^2 dV$$

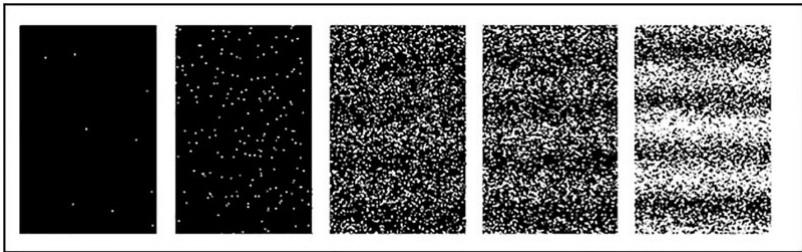
é a probabilidade de que a partícula seja encontrada no tempo t dentro do volume dV em torno do ponto (x, y, z) .

A probabilidade de encontrar a partícula na região V o tempo t é:

$$\iiint_V |\Psi(x, y, z, t)|^2 dV.$$

A função de onda precisa ser **normalizada**:

$$\iiint_{\mathbb{R}^3} |\Psi(x, y, z, t)|^2 dV.$$



Evolução temporal da função de onda

Na física clássica um sistema mecânico é descrito pelo vetor

$$\vec{r}(t) = (x(t), y(t), z(t)).$$

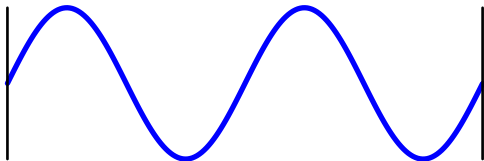
A evolução temporal do sistema pode ser encontrada se resolvermos a equação :

$$\vec{F} = m\vec{r}''$$

e encontrarmos a solução que satisfaz as condições iniciais

$$\vec{r}(0), \vec{r}'(0)$$

A descrição de fenômenos ondulatórios é feita através da **equação de onda**.



O Problema de Valor Inicial e de Fronteira do problema da corda elástica com extremidades fixas e sem a ação de forças externas:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < x < L, \quad t > 0;$$

$$u(0, t) = 0, \quad u(L, t) = 0, \quad t \geq 0;$$

$$u(x, 0) = f(x), \quad \frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = g(x); \quad 0 \leq x \leq L$$

A função de onda deve satisfazer uma equação chamada **equação de Schrödinger**:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi$$

H é um operador associado à energia do sistema, chamado **operador Hamiltoniano**.

Para encontrar a função de onda que descreve um sistema, temos que resolver a equação de Schrödinger e encontrar a solução que satisfaz as condições iniciais e condições de contorno adequadas.

Como encontrar a evolução temporal da função de onda?

- ▶ Determinar H ;

- ▶ Determinar H ;
- ▶ Resolver a equação de Schrödinger;

- ▶ Determinar H ;
- ▶ Resolver a equação de Schrödinger;
- ▶ Encontrar a solução que satisfaz as condições iniciais e condições de contorno adequadas.

Na física quântica cada grandeza física é associada a um **operador**.

Mecânica clássica

$$E = K + U$$

Mecânica clássica

$$E = K + U$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + U$$

$$p \longmapsto -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$E \mapsto H$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + U(x)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)$$