Física IV para a Escola Politécnica (Engenharia Elétrica)

4320293 – TURMA 3

Professor: Dr. Marcos A. G. Alvarez

Departamento de Física Nuclear (DFN) – IFUSP

Edifício Oscar Sala – (sala 246)

Escaninho 22

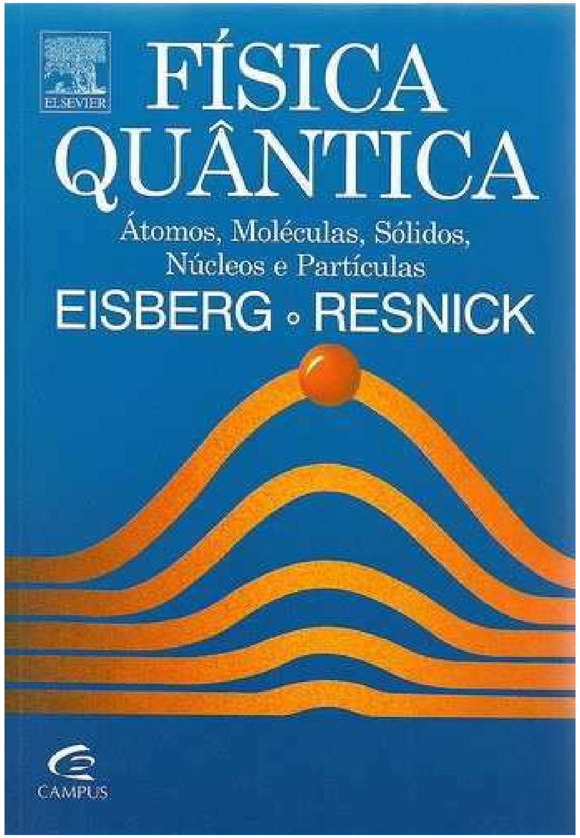
malvarez@if.usp.br

LIVRO: Princípios de Física (Óptica e Física Moderna)

Raymond A. Serway / John W. Jewett Jr.

Volume 4

CAPÍTULO 28: Física Quântica



- ❑ O Princípio da Incerteza

- ❑ Mecânica Quântica

- ❑ Uma Partícula em uma Caixa

- ❑ **A Equação de Schrödinger**

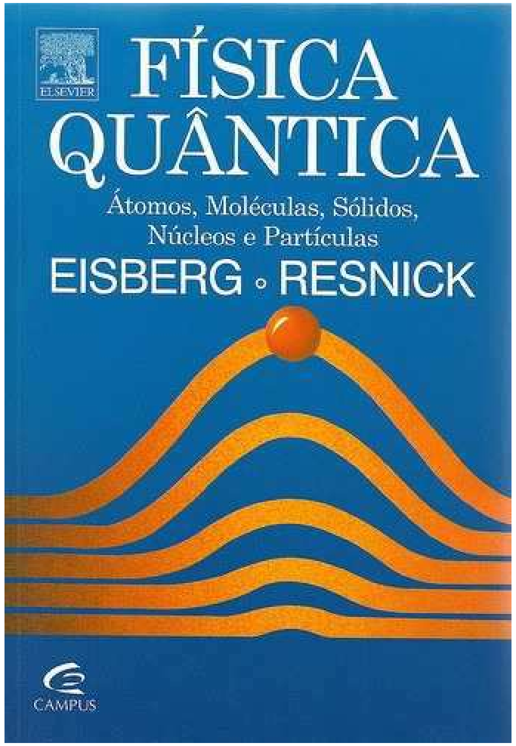
- ❑ Tunelamento através de uma Barreira de Energia Potencial

Lista de exercícios sugerida – Capítulo 28:

28.4, .12, 13, 14, 15, 16, 19, 20, 21, 33, 35, 38, 42, 43, 52

CAPÍTULO 29: Física Atômica

- **A Equação de Schrödinger**
- **Modelos Estruturais Primitivos do átomo**
- **O Átomo de Hidrogênio (H)**
- O Número Quântico Magnético do Spin
- As funções de onda para o Hidrogênio
- Interpretação Física dos Números Quânticos
- O Número Quântico Orbital
- O Spin do Elétron
- O Princípio da Exclusão e a Tabela Periódica
- Espectros Atômicos no Visível e de Raios-X



Lista de exercícios sugerida – Capítulo 29:
29.2, 4, 7, 9, 10, 17, 18, 15, 27, 29, 37, 25, 39, 44, 49, 51, 53, 55, 56

❑ **A Equação de Schrödinger**

❑ A **amplitude de probabilidade** ou **função de onda** da **Mecânica Quântica**

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\psi=E\psi$$

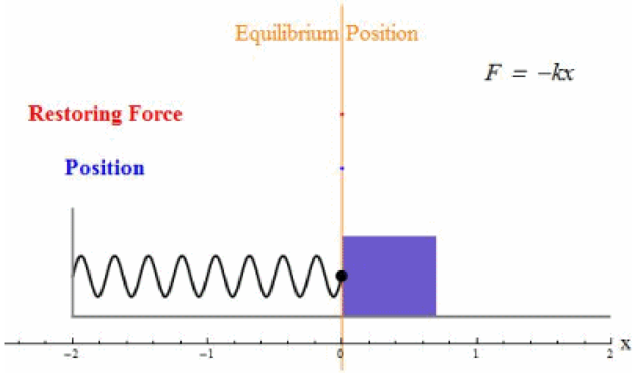
$$x \approx \psi\left(x, y, z\right)$$

❑ **O que lembra esta equação???**

Argumentos para chegar à Equação de Schrödinger:

A **<u>equação de onda</u>** para uma mola elástica pode ser obtida a partir da Lei de Newton:

$$\vec{F} = -k\vec{x}$$



<u>Equação diferencial</u> $m\dfrac{d^2\vec{x}}{dt^2} = -k\vec{x}$

substituindo $x \approx \psi(x, y, z)$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + cte\,\psi(x) = 0$$

Não podemos obter a equação de onda da mecânica quântica a partir das **equações da Física Clássica**.

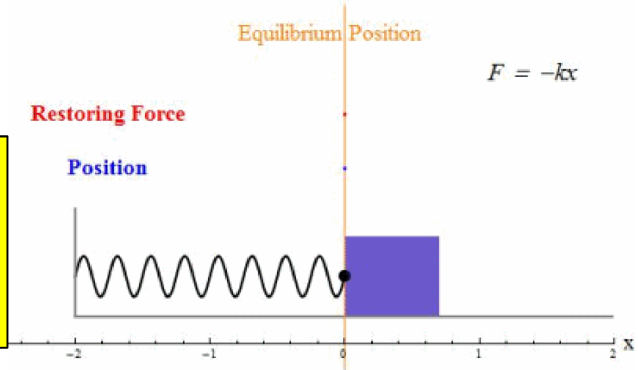
No entanto, podemos encontrar um caminho para a **conexão** entre **<u>Mecânica Clássica</u>** e **<u>Mecânica Quântica</u>** através das **equações de "de Broglie" e Einstein**

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad \text{e} \quad f = \frac{E}{h}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo e em uma dimensão.

Para obter a **equação de Schrödinger** **independente do tempo** são **necessárias três relações**:

Energia Mecânica: $E = E_c + V$

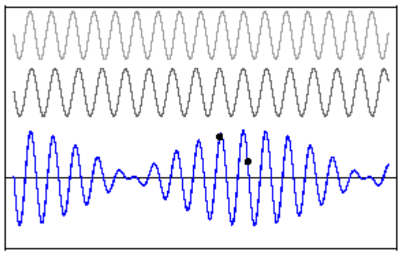


Oscilador harmônico: $$\frac{d^2\psi}{dx^2} + cte\,\psi = 0$$

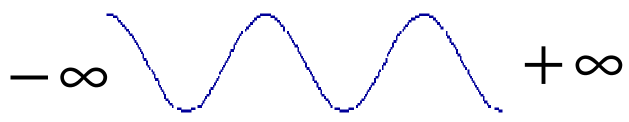
Relações de De Broglie e Einstein: $$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad \text{e} \quad f = \frac{E}{h}$$

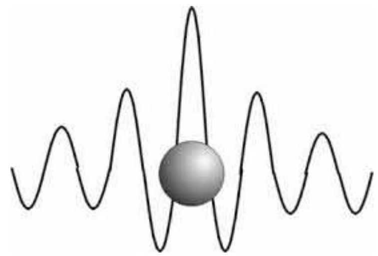
onde ψ é a **função de onda** – **amplitude de probabilidade**,

- λ é o comprimento de onda,
- h é a constante de Planck e
- p é o momento linear.



Existem **quatro hipóteses** relacionadas com as **propriedades desejadas** para a **função de onda da mecânica quântica**.





1) A **função de onda da mecânica quântica** deve considerar e ser consistente com os **postulados de “de Broglie” e “Einstein”**.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\mathrm{v}} \quad \text{e} \quad f = \frac{E}{h}$$

2) deve ser consistente com a equação:

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

relaciona a **energia total “E”** de uma partícula de massa “m” com sua **energia cinética** e sua **energia potencial**

3) Ela deve ser *linear* em $\Psi(x,t)$

Isto é, se $\Psi_1(x,t)$ e $\Psi_2(x,t)$

são duas soluções diferentes da equação para uma dada energia potencial V (equações diferenciais parciais têm muitas soluções), então **qualquer combinação linear arbitrária dessas soluções**

$$\Psi(x,t) = c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t)$$

também é uma solução.

Esta combinação é dita **linear** porque envolve a primeira potência (potência linear) de

$$\Psi_1(x,t) \text{ e } \Psi_2(x,t)$$

é dita **arbitrária** porque as constantes c1 e c2 podem ter valores quaisquer (arbitrários). Esta exigência de linearidade garante que podemos **<u>somar funções de onda para produzir as interferências construtivas e destrutivas</u>** que são tão características de ondas.

4) A **Energia potencial V** é, em geral, uma função de “x” e possivelmente até de “t”. No entanto há um caso especial importante no qual

$$V(x,t) = V_0$$

Este é exatamente o **caso da partícula livre**, já que a força que atua sobre a partícula é:

$$F = \frac{\partial V(x,t)}{\partial x}$$

que resulta em **F=0 se *V_0* é uma constante**.

Neste caso a Lei de Newton nos diz que o momento ***”p”*** da partícula será **constante**, e também sabemos que sua **energia total “E” será constante**.

Temos uma situação de **partícula livre com valores constantes de**:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\mathrm{v}} \quad \text{e} \quad f = \frac{E}{h}$$

Portanto, supomos que neste caso, a **equação diferencial desejada** admitirá **soluções de onda senoidal** com **comprimentos de onda e frequência constantes** similares à função de onda senoidal:

$$\Psi(x,t) = Asen2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - ft\right)$$

Usando as **equações de de Broglie-Einstein**

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\mathrm{v}} \quad \mathrm{e} \quad f = \frac{E}{h}$$

para escrever a equação da energia total,

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x,t)$$

em termos de "λ" e "f" temos:

Dadas as equações:

$$E=\frac{p^2}{2m}+V(x,t)$$

$$E=hf$$

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

$$k=\frac{2\pi}{\lambda}\Rightarrow\lambda=\frac{2\pi}{k} \quad \text{e}$$

$$\omega=2\pi \mathrm{f}\Rightarrow \mathrm{f}=\frac{\omega}{2\pi}$$

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

Mostre que a equação $E=\frac{p^2}{2m}+V(x,t)$

pode ser escrita na seguinte forma dependente de "λ" e "f"

$$\hbar\omega=\frac{k^2\hbar^2}{2m}+V(x,t)$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x,t)$$

$$E = hf$$

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

$$p^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2$$

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(\frac{h}{\lambda}\right)^2$$

$$hf = \frac{h^2}{2m\lambda^2} + V(x,t)$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \text{e} \quad \omega = 2\pi \mathrm{f} \Rightarrow \mathrm{f} = \frac{\omega}{2\pi}$$

$$h\frac{\omega}{2\pi} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} + V(x,t)$$

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

$$\lambda = \frac{2\pi}{k}$$

$$\hbar\omega = \frac{h^2}{2m\left(\frac{2\pi}{k}\right)^2} + V(x,t)$$

$$\boxed{\hbar\omega = \frac{k^2\hbar^2}{2m} + V(x,t)}$$

Para satisfazer as <u>**HIPÓTESES 1 e 2**</u> **(as equações da energia total e de “de Broglie- Eintein”)** **a equação de onda deve ser consistente com a equação acima**

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x,t) \Rightarrow \hbar\omega = \frac{k^2\hbar^2}{2m} + V(x,t)$$

Para que a **equação diferencial seja linear** em $\Psi(x,t)$

ela não pode conter nenhum termo independente de $\Psi(x,t)$

isto é, que seja proporcional a $[\Psi(x,t)]^0$

ou que seja proporcional a $[\Psi(x,t)]^2$

HIPÓTESE 3

ou a qualquer potência superior.

Após obter esta equação, poderemos demonstrar explicitamente que ela é linear em $\Psi(x,t)$

e no processo a validade desta informação será evidente.

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x,t) \Rightarrow \hbar\omega = \frac{k^2\hbar^2}{2m} + V(x,t)$$

Vamos utilizar agora a **HIPÓTESE 4,** que se relaciona com a forma da **solução para a partícula livre**.

$$V(x,t) = V_0$$

$$F = \frac{\partial V(x,t)}{\partial x} \Rightarrow F = 0 \text{ para } V_0 \equiv cte$$

Como é sugerido pela hipótese, **a Lei de Newton nos diz que o momento *"p"* da partícula** será **constante**, e também sabemos que sua **energia total "E" será constante**.

Vamos assumir a equação contendo a função de onda senoidal

$$\Psi(x,t) = Asen2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - ft\right) \Rightarrow Asen(kx - \omega t)$$

e/ou as derivadas desta função, para obter nossa equação diferencial

Equação a ser respeitada

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x,t) \Rightarrow \hbar\omega = \frac{k^2\hbar^2}{2m} + V(x,t)$$

Candidata a função de onda

$$\psi(x,t) = sen\left(\frac{2\pi x}{\lambda} - \omega t\right) = sen(kx - \omega t)$$

Calcule as derivadas parciais da função de onda senoidal candidata

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x},\ \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t},\ \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2},\ \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial t^2}$$

$$E=\frac{p^2}{2m}+V(x,t)\Rightarrow \hbar\omega=\frac{\boxed{k^2}\hbar^2}{2m}+V(x,t)$$

$$\psi(x,t)=sen\left(\frac{2\pi x}{\lambda}-\omega t\right)=sen(kx-\omega t)$$

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}=\frac{\partial sen(kx-\omega t)}{\partial x}=k\cos(kx-\omega t)$$

$$\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}=k\frac{\partial\cos(kx-\omega t)}{\partial x}=-\boxed{k^2}sen(kx-\omega t)$$

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=\frac{\partial sen(kx-\omega t)}{\partial t}=-\omega\cos(kx-\omega t)$$

$$\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial t^2}=\frac{\partial\cos(kx-\omega t)}{\partial t}=-\omega^2 sen(kx-\omega t)$$

Inspecionando-as, vemos que o efeito de tomar a **segunda derivada parcial espacial** é introduzir um **fator –k²**,
e o efeito de tomar a **primeira derivada parcial temporal** é introduzir um **fator –ω.**

Como a **equação diferencial** que procuramos deve ser consistente com:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x,t) \Rightarrow \hbar\omega = \frac{\boxed{k^2} \cdot \hbar^2}{2m} + V(x,t)$$

A qual contém **os fatores k^2 em um termo e ω** em outro, esses fatos sugerem que a equação diferencial deve conter uma **segunda derivada espacial de** $\Psi(x,t)$ e uma **primeira derivada temporal de** $\Psi(x,t)$

Mas deve conter também um **termo V(x,t).** Para manter a **linearidade** este termo deve conter um fator de $\Psi(x,t)$

CONSIDERANDO

$$\psi(x,t) = sen\left(\frac{2\pi x}{\lambda} - \omega t\right) = sen(kx - \omega t)$$

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = \frac{\partial sen(kx-\omega t)}{\partial x} = k\cos(kx-\omega t)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = k\frac{\partial \cos(kx-\omega t)}{\partial x} = -k^2 sen(kx-\omega t)$$

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial sen(kx-\omega t)}{\partial t} = -\omega\cos(kx-\omega t)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial t^2} = \frac{\partial \cos(kx-\omega t)}{\partial t} = -\omega^2 sen(kx-\omega t)$$

A equação diferencial para $\frac{k^2\hbar^2}{2m} + V(x,t) = \hbar\omega$

pode ser tentada na forma…

$$\frac{k^2\hbar^2}{2m}+V(x,t)=\hbar\omega$$

Juntando todas estas idéias tentamos a seguinte forma para a equação diferencial:

$$\alpha\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x,t)\Psi(x,t)=\beta\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

onde, $\Psi(x,t)=sen(kx-\omega t)$

$$V(x,t)\equiv V_0\equiv cte$$

$$\alpha\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+V_0\Psi(x,t)=\beta\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

Exercício: **Montar a equação acima e verificar se a igualdade é satisfeita para qualquer combinação de “x” e “t”**

$$\frac{\boxed{k^2}\hbar^2}{2m}+V(x,t)=\hbar\omega$$

Juntando todas estas idéias tentamos a seguinte forma para a equação diferencial:

$$\alpha\boxed{\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}}+V(x,t)\Psi(x,t)=\beta\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

$$\text{onde,}\quad \Psi(x,t)=sen(kx-\omega t)$$

$$V(x,t)\equiv V_0\equiv cte$$

$$\alpha\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+V_0\Psi(x,t)=\beta\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=$$

$$-\alpha sen(kx-\omega t)k^2+sen(kx-\omega t)V_0=-\beta\cos(kx-\omega t)\omega$$

$$\alpha\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+V_0\Psi(x,t)=\beta\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=$$

$$-\alpha sen(kx-\omega t)k^2+sen(kx-\omega t)V_0=-\beta\cos(kx-\omega t)\omega$$

Esta equação não está de acordo com (não é válida para todas as combinações de “x” e “t”):

$$E=\frac{p^2}{2m}+V(x,t)\Rightarrow\hbar\omega=\frac{k^2\hbar^2}{2m}+V(x,t)$$

O problema surge porque a derivação **troca cos por sen** e vice-versa. Este fato **sugere** que devemos tentar usar para a **função de onda da partícula livre**, não a única função senoidal, mas uma **combinação** do tipo:

$$\Psi(x,t)=\cos(kx-\omega t)+\gamma sen(kx-\omega t)$$

onde **γ é uma constante** de valor ainda indeterminado, que é introduzida para dar flexibilidade adicional.

$$\Psi(x,t) = \cos(kx - \omega t) + \gamma sen(kx - \omega t)$$

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = -ksen(kx - \omega t) + k\gamma \cos(kx - \omega t)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = -k^2 \cos(kx - \omega t) - k^2 \gamma sen(kx - \omega t)$$

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \omega sen(kx - \omega t) - \omega\gamma \cos(kx - \omega t)$$

Substituindo em: $\alpha \dfrac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = \beta \dfrac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$

Para que condições a igualdade é válida <u>para todas as possíveis combinações das variáveis independentes “x” e “t”</u> ?

Temos:

$$-\alpha k^2\cos(kx-\omega t)-\boxed{\alpha k^2\gamma}\,sen(kx-\omega t)+V_0\cos(kx-\omega t)\boxed{+V_0\gamma}\,sen(kx-\omega t)=$$

$$\boxed{\beta\omega}\,sen(kx-\omega t)-\beta\omega\gamma\cos(kx-\omega t)$$

$$\boxed{\left[-\alpha k^2+V_0+\beta\omega\gamma\right]}\cos(kx-\omega t)+\boxed{\left[-\alpha k^2\gamma+V_0\gamma-\beta\omega\right]}sen(kx-\omega t)=0$$

Para que a igualdade acima seja **válida para todas as possíveis combinações das variáveis independentes “x” e “t”** é necessário que **os coeficientes** tanto do **seno** como do **cosseno** sejam **zero**.

Para isso:

$$\boxed{-\alpha k^2+V_0=-\beta\gamma\omega}$$

e

$$\boxed{-\alpha k^2+V_0=\frac{\beta\omega}{\gamma}}$$

Agora temos três equações algébricas que devemos satisfazer:

$$k^2 \frac{\hbar^2}{2m} + V(x,t) = \hbar\omega \qquad (1)$$

$$-\alpha k^2 + V_0 = -\beta\gamma\omega \qquad (2)$$

e

$$-\alpha k^2 + V_0 = \frac{\beta\omega}{\gamma} \qquad (3)$$

E três constantes livres, à nossa disposição. **Subtraindo (3) de (2)**

$$0 = -\beta\gamma\omega - \frac{\beta\omega}{\gamma}$$

ou

$$\gamma = -\frac{1}{\gamma} \qquad \gamma^2 = -1$$

Ou $\gamma = \pm\sqrt{-1} \equiv \pm i$

Substituindo este resultado em (2) $\quad -\alpha k^2 + V_0 = -\beta\gamma\omega \qquad (2)$

Temos $\quad \boxed{-\alpha} k^2 + V_0 = \boxed{\pm i\beta}\,\omega$

Este resultado pode ser comparado diretamente com (1)

$$k^2 \frac{\hbar^2}{2m} + V(x,t) = \boxed{\hbar}\,\omega \qquad (1)$$

Resultando em:

$$\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m} \qquad (5)$$

e $\pm i\beta = \hbar$ ou

$\beta = \pm i\hbar \qquad (6)$

$$\Psi(x,t) = \cos(kx - \omega t) + \gamma sen(kx - \omega t)$$

Escreva a equação diferencial

$$\alpha \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = \beta \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

em função de

$$\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m} \qquad (5)$$

$$\beta = \pm i\hbar \qquad (6)$$

Há duas escolhas de sinal em (6): $\pm i\beta = \hbar$

$$\beta = \pm i\hbar \qquad (6)$$

Observa-se que a consequência de qual escolha é feita não é significante, e portanto seguimos o uso convencional e escolhemos o sinal positivo. Então ficamos com

$$\beta = +i\hbar \qquad (6)$$

e com a equação (5) $\alpha = -\dfrac{\hbar^2}{2m} \qquad (5)$

podemos calcular todas as constantes na forma suposta para a equação diferencial, logo a equação:

$$\alpha \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = \beta \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

Fica,

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

Esta equação satisfaz a todas as hipóteses relativas à
equação de onda da mecânica quântica. **Esta é a Equação de Schrödinger**

Seção 28.12 – Exercício 40 – A Equação de Schrödinger

A função de onda de uma partícula á dada por:

$$\psi(x) = A\cos(kx) + Bsen(kx)$$

Onde A, B e k são constantes. Mostre que ψ é uma solução da equação de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

Supondo que a partícula é livre (U=0) e encontre a energia correspondente “E” da partícula.

$$\psi(x) = A\cos(kx) + Bsen(kx)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = -kAsenkx + kB\cos kx$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2 A\cos kx - k^2 Bsenkx$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-k^2 A\cos kx - k^2 Bsenkx\right) + \left[V\left(A\cos kx + Bsenkx\right)\right] = \left[E\left(A\cos kx + Bsenkx\right)\right]$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-k^2\right)\Psi(x) = (E - V)\Psi(x)$$

$$V = 0 \Rightarrow E = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(-k^2\right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Seção 28.12 – Exercício 41 – A Equação de Schrödinger

Mostre que a função de onda $\psi = Ae^{-i(kx - \omega t)}$

é uma solução da equação espacial de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

para $\mathrm{V} = 0$ e $E = \dfrac{p^2}{2m}$

$$\psi = Ae^{-i(kx-\omega t)}; \qquad \frac{\partial \psi}{\partial x} = A(-ik)e^{-i(kx-\omega t)}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = A(+i^2k^2)e^{-i(kx-\omega t)} = -k^2 Ae^{-i(kx-\omega t)} = -k^2\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

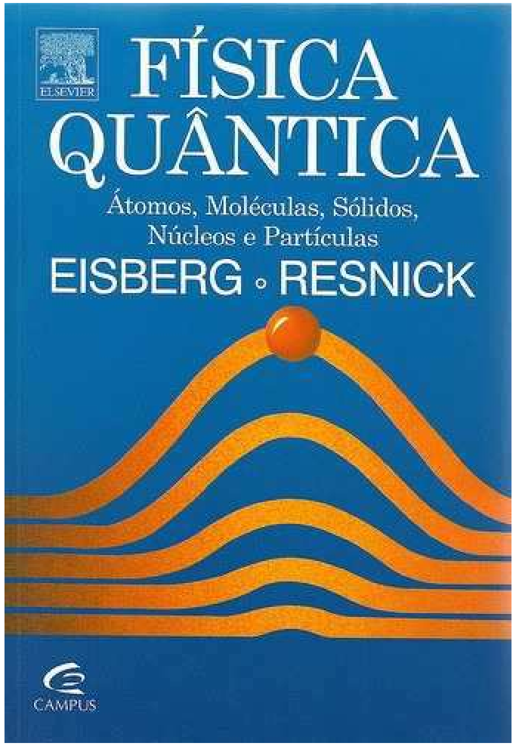
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-k^2\Psi(x)\right) = (E-V)\Psi(x) \Rightarrow k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)$$

$$V = 0 \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$k^2 = \frac{(2\pi)^2}{\lambda^2} = \frac{(2\pi)^2}{\left(\frac{h}{p}\right)^2} = \frac{p^2}{\hbar^2} \Rightarrow \frac{p^2}{\hbar^2} = \frac{2m}{\hbar^2}E \quad \text{ou} \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

CAPÍTULO 29: Física Atômica

- ❑ **A Equação de Schrödinger**
- ❑ **Modelos Estruturais Primitivos do átomo**
- ❑ **O Átomo de Hidrogênio (H)**
- ❑ O Número Quântico Magnético do Spin
- ❑ As funções de onda para o Hidrogênio
- ❑ Interpretação Física dos Números Quânticos
- ❑ O Número Quântico Orbital
- ❑ O Spin do Elétron
- ❑ O Princípio da Exclusão e a Tabela Periódica
- ❑ Espectros Atômicos no Visível e de Raios-X



Lista de exercícios sugerida – Capítulo 29:

29.2, 4, 7, 9, 10, 17, 18, 15, 27, 29, 37, 25, 39, 44, 49, 51, 53, 55, 56

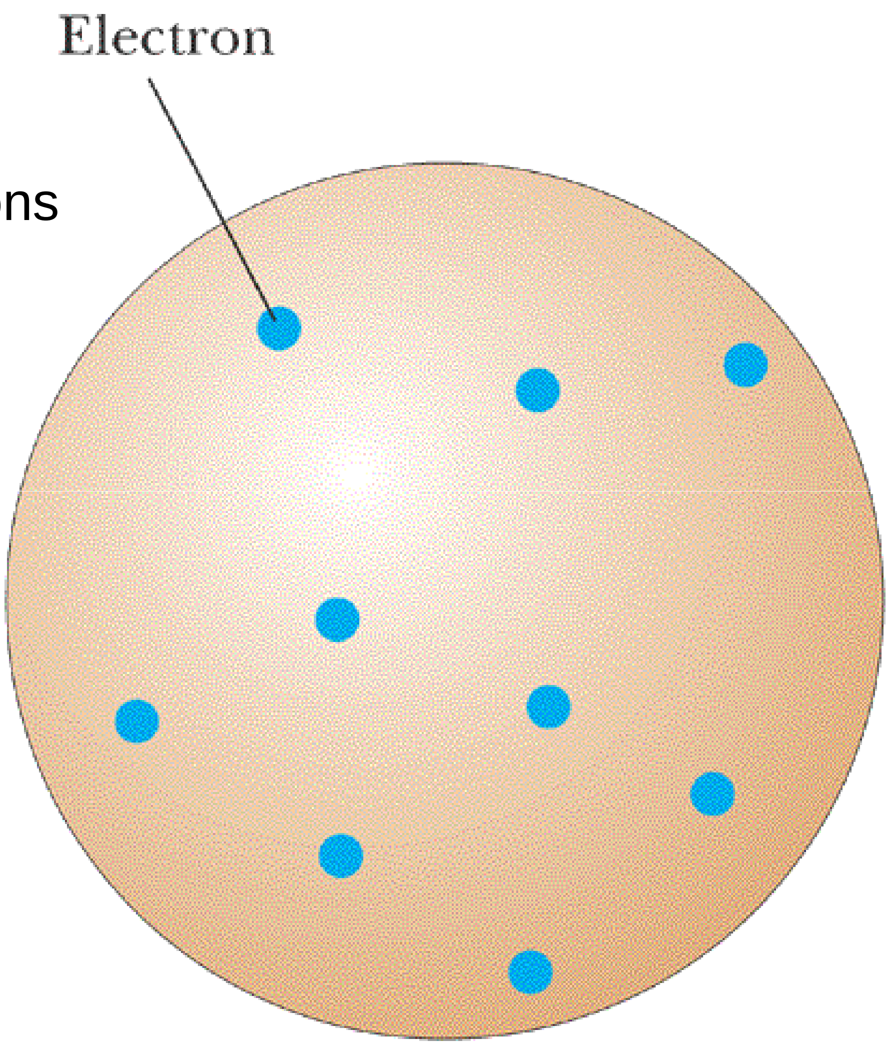
- Modelos Estruturais Primitivos do Átomo

O **modelo de Thompson** com os elétrons embutidos no átomo.

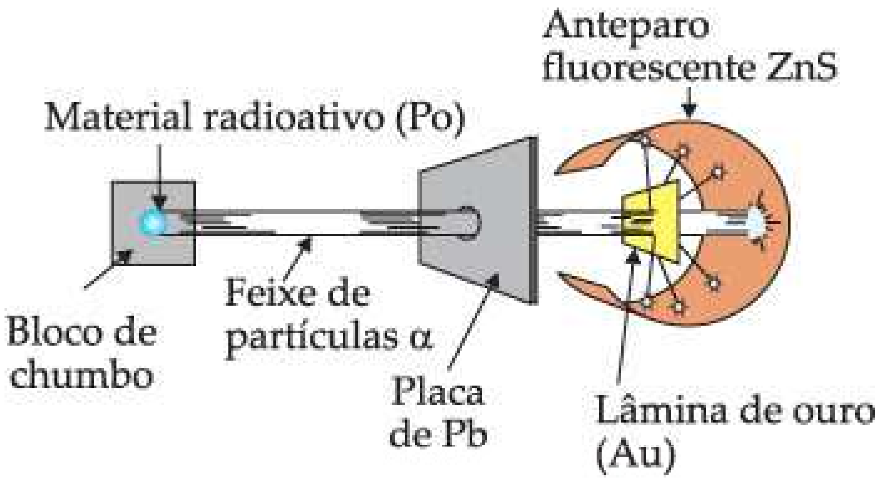
Modelo do <u>**pudim de passas**</u>

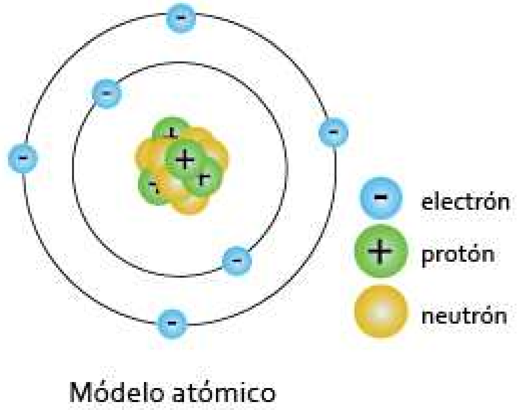
Volume contínuo de cargas positivas (prótons) e negativas (elétrons)

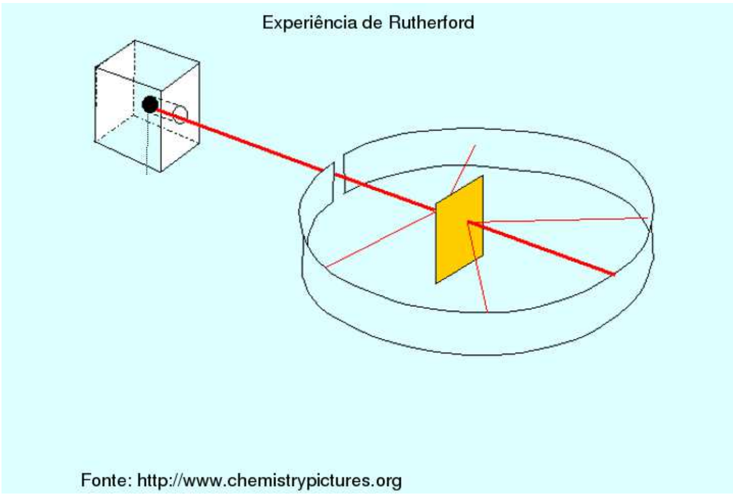
Serway/Jewett; Principles of Physics, 3/e
Figure 29.1



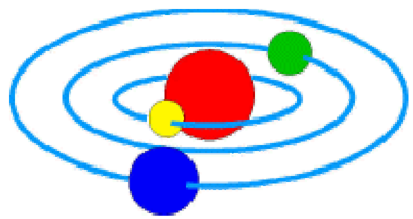
(a) Técnica de Rutherford para observar o espalhamento de partículas alfa por um alvo



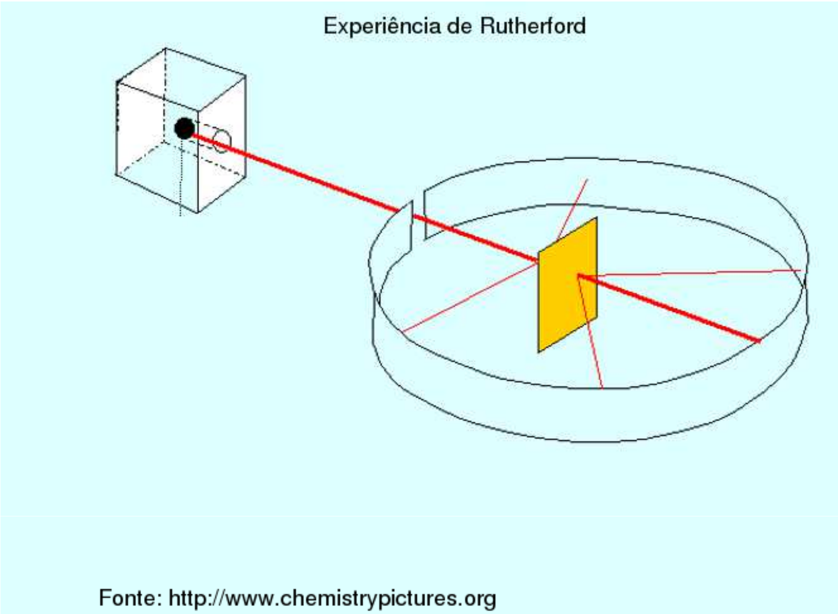


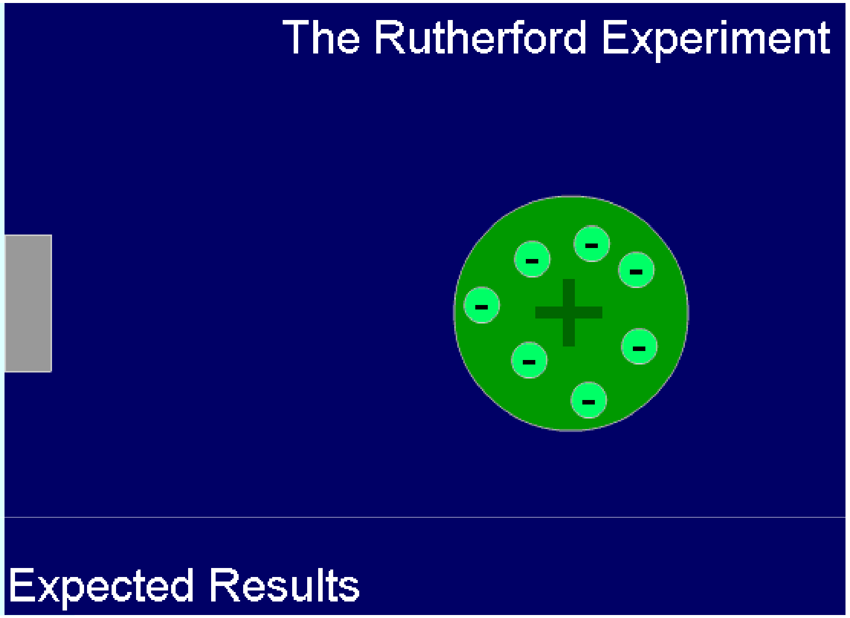


(b) **Modelo planetário de Rutherford para o átomo**

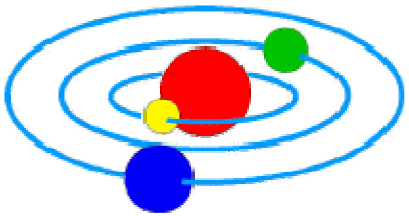


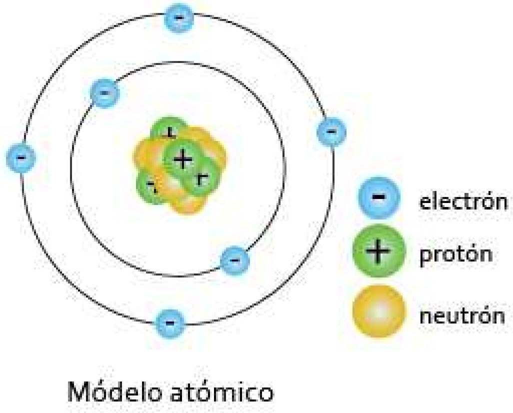
(a) Técnica de Rutherford para observar o espalhamento de partículas alfa por um alvo





(b) Modelo planetário de Rutherford para o átomo

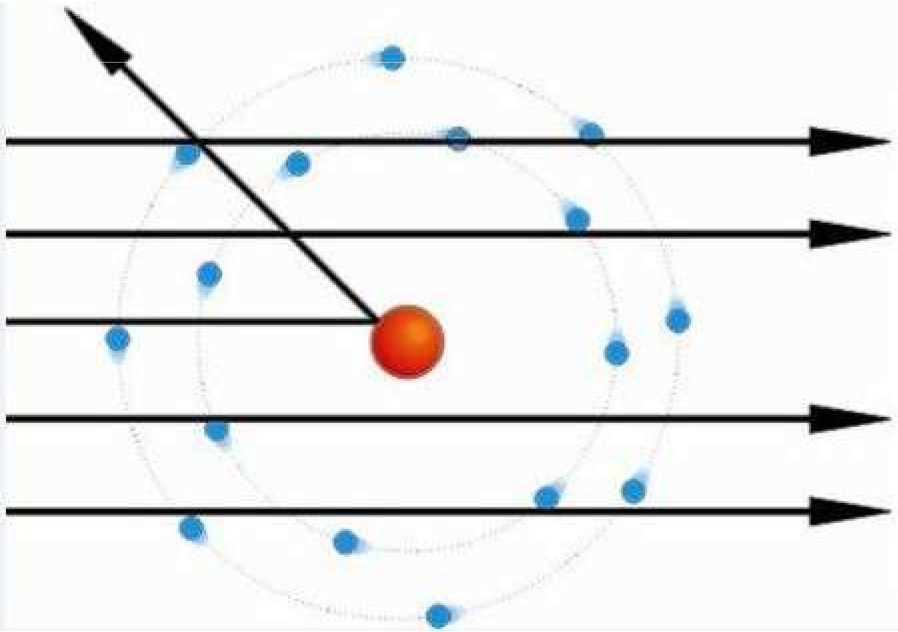


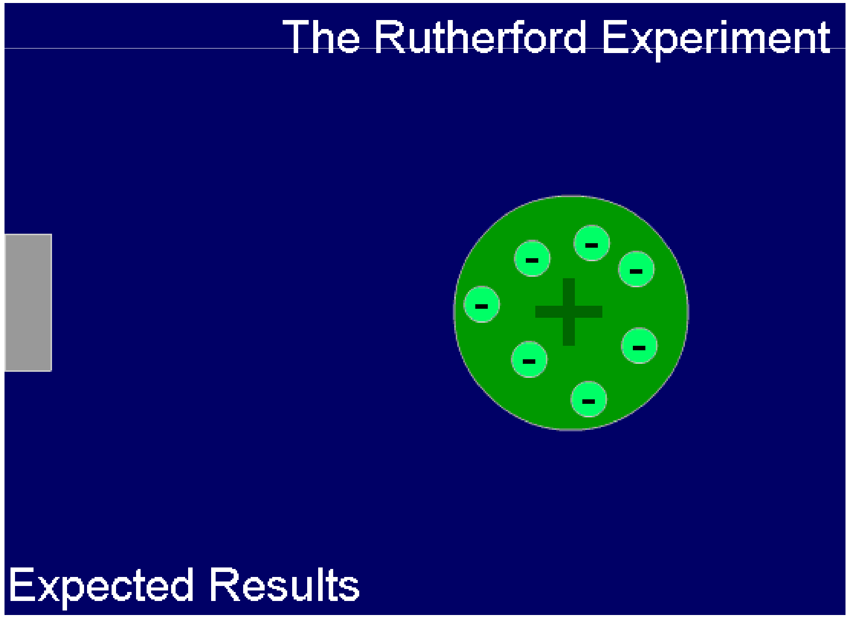


(a) Técnica de Rutherford para observar o espalhamento de partículas alfa por um alvo:

- A maioria das partículas atravessava a película (alvo) sem interação (como se estivesse percorrendo o vácuo)

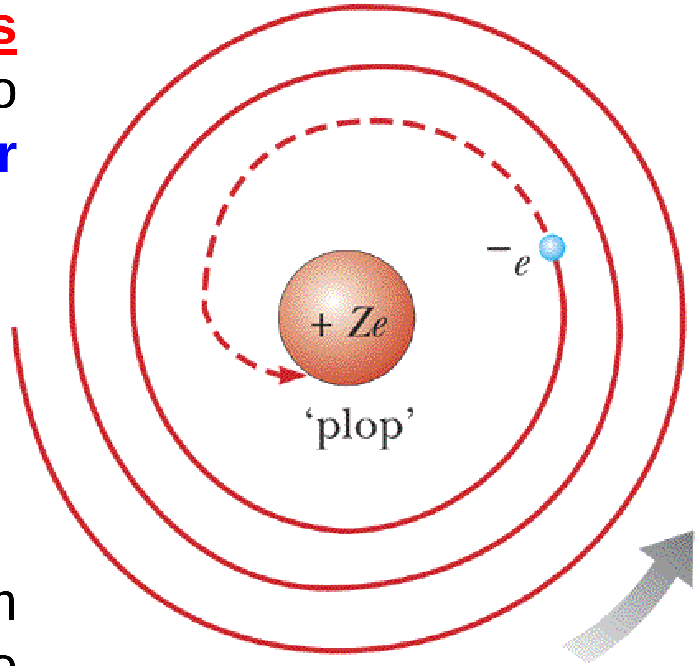
- Partículas eram desviadas a distintos ângulos, incluindo ângulos muito grandes (~180º)





Serway/Jewett; Principles of Physics, 3/e
Figure 29.3

De acordo com as **Leis de Maxwell** <u>**cargas**</u> orbitando com frequência f têm aceleração centrípeta e portanto **deveriam irradiar ondas eletromagnéticas de frequência f**.



Expectativa clássica para o átomo nuclear:

Como os elétrons acelerados irradiam energia, a órbita deveria ir decaindo até que o elétron caísse dentro do núcleo.

POSTULADOS DE BOHR

1. Um elétron em um átomo se move em uma órbita circular em torno do núcleo sob influência da atração coulombiana entre o elétron e o núcleo. obedecendo às Leis da Mecânica Clássica.

2. No lugar da infinidade de órbitas que seriam possíveis, segundo a Mecânica Clássica, um elétron só pode se mover em uma órbita na qual seu momento angular orbital "L" é um múltiplo inteiro de "$\hbar$" (a constante de Planck "h" dividida por 2π.

3. Apesar de estar constantemente acelerado, um elétron que se move em uma dessas órbitas possíveis não emite radiação eletromagnética. Portanto sua energia total *"E"* permanece constante

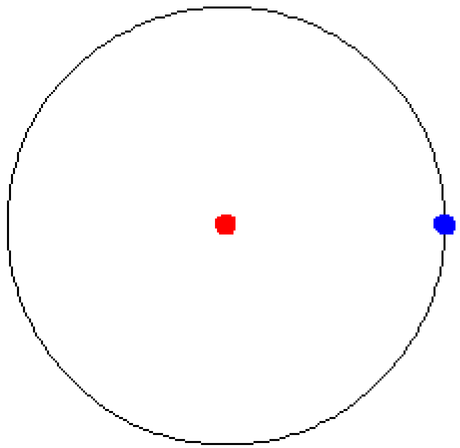
4. É emitida radiação eletromagnética se um elétron, que se move inicialmente sobre uma órbita de energia total *"Ei"*, muda seu movimento descontinuamente de forma a se mover em uma órbita de energia total *"Ef"*.

- A frequência da radiação emitida "f" é igual à quantidade (Ei-Ef) dividida pela constante de Planck "h".

POSTULADOS DE BOHR

1. Um elétron em um átomo se move em uma órbita circular em torno do núcleo sob influência da atração coulombiana entre o elétron e o núcleo, obedecendo às Leis da Mecânica Clássica.

Este postulado baseia o modelo de Bohr na existência do núcleo atômico, seguindo os resultados experimentais de Rutherford.



$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2} = m\frac{\mathrm{v}^2}{r}$$

$\mathrm{v} \equiv$ velocidade do elétron em sua órbita

$\mathrm{r} \equiv$ o raio da órbita

Modelo de Bohr:

- **Órbitas circulares**
- **estados estacionários**

POSTULADOS DE BOHR

1. Um elétron em um átomo se move em uma órbita circular em torno do núcleo sob influência da atração coulombiana entre o elétron e o núcleo. obedecendo às Leis da Mecânica Clássica.

2. No lugar da infinidade de órbitas que seriam possíveis, segundo a Mecânica Clássica, um elétron só pode se mover em uma órbita na qual seu momento angular orbital "L" é um múltiplo inteiro de "ħ" (a constante de Planck "h" dividida por 2π).

3. Apesar de estar constantemente acelerado, um elétron que se move em uma dessas órbitas possíveis não emite radiação eletromagnética. Portanto sua energia total *"E"* permanece constante

4. É emitida radiação eletromagnética se um elétron, que se move inicialmente sobre uma órbita de energia total *"Ei"*, muda seu movimento descontinuamente de forma a se mover em uma órbita de energia total *"Ef"*.

- A frequência da radiação emitida "f" é igual à quantidade (Ei-Ef) dividida pela constante de Planck "h".

POSTULADOS DE BOHR

2. No lugar da infinidade de órbitas que seriam possíveis, segundo a Mecânica Clássica, um elétron só pode se mover em uma órbita na qual seu momento angular orbital “L” é um múltiplo inteiro de “ħ” (a constante de Planck “h” dividida por 2π.

Este postulado introduz a quantização.

Porém existe uma **diferença** entre o modelo de **quantização de Bohr** do ***momento angular orbital*** de um elétron atômico

$$L = n\hbar \quad \mathrm{n} = 1,2,3$$

se movendo sob a influência de uma força (coulombiana) inversamente proporcional ao quadrado da distância, e a **quantização de Planck** da ***energia*** de uma partícula, como um elétron, que executa movimento harmônico simples sob influência de uma força restauradora harmônica:

$$E = nhf \quad (\mathrm{n} = 0,1,2...)$$

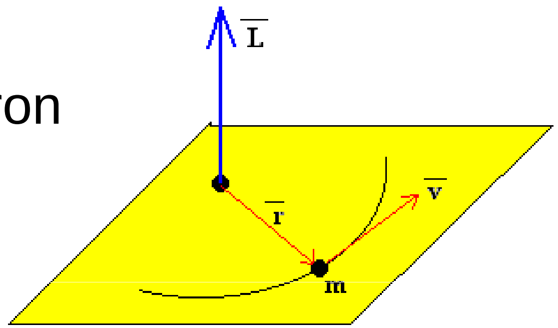
$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2} = m\frac{\mathrm{v}^2}{r}$$

F = *ma* – Lei de Newton, onde “a” é a aceleração centrípeta que mantém o elétron em sua órbita circular.

$\mathrm{v} \equiv$ velocidade do elétron em sua órbita

$\mathrm{r} \equiv$ o raio da órbita

Força Coulombiana que atua sobre o elétron



O momento angular orbital do elétron $$L = m\mathrm{v}r$$

deve ser uma constante, pois a força que atua sobre o elétron é central.

Aplicando a condição de quantização $$L = n\hbar \quad \mathrm{n} = 1,2,3$$

$$m\mathrm{v}r = n\hbar \quad (\mathrm{n} = 1,2,3...)$$

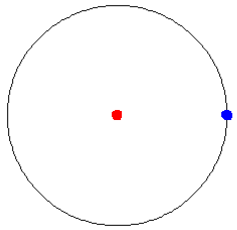
$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2} = m\frac{\mathrm{v}^2}{r}$$

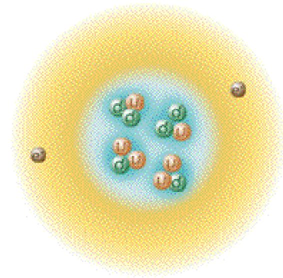
$$\mathrm{v} = \frac{n\hbar}{mr} \Rightarrow \mathrm{v}^2 = \left(\frac{n\hbar}{mr}\right)^2$$

$\mathrm{v} \equiv$ velocidade do elétron em sua órbita

$\mathrm{r} \equiv$ o raio da órbita

$$\text{De Broglie: dualidade onda-partícula: } \lambda = \frac{h}{p}$$





$$\text{quantização das órbitas (momento angular): } n\lambda = 2\pi r \Rightarrow n\frac{h}{p} = 2\pi r \Rightarrow$$

$$L = n\hbar = m\text{v}r \ (1)$$

$$n^2\hbar^2 = m^2\text{v}^2r^2 \Rightarrow \frac{n^2\hbar^2}{m^2r^2} = \text{v}^2$$

$$\text{estados estacionários: } F = ma = m\frac{\text{v}^2}{r} = \frac{Ze^2}{cte \cdot r^2} \Rightarrow \frac{mn^2\hbar^2}{rm^2r^2} = \frac{Ze^2}{cte \cdot r^2} \Rightarrow$$

$$r = cte\frac{n^2\hbar^2}{Ze^2m} \ (2), \text{ onde cte} = 4\pi\varepsilon_0$$

$$\text{Substituindo (2) em (1): v} = \frac{n\hbar}{mr} = \frac{n\hbar}{m \cdot cte\frac{n^2\hbar^2}{Ze^2m}} \Rightarrow \text{v} = \frac{1}{cte}\frac{Ze^2}{n\hbar} \ (3)$$

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2} = m\frac{\mathrm{v}^2}{r} = F$$

$$\mathrm{v} \equiv \text{velocidade do elétron em sua órbita}$$

$$\mathrm{r} \equiv \text{o raio da órbita}$$

A energia potencial de um elétron atômico se movendo em uma das órbitas possíveis é dada por

$$V = -\int_r^{\infty} \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\,dr = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

Definimos a energia potencial como sendo **zero** quando o **elétron está infinitamente longe do núcleo.**
Então **a energia potencial V a qualquer distância finita "r"** pode ser obtida integrando-se **o trabalho que seria realizado pela força coulombiana que atua de "r" a ∞**

A energia potencial é negativa porque a força é atrativa. É necessário trabalho, contra esta força atrativa, para mover um elétron de "r" ao infinito.

Exercício: Dada a **condição para órbita circular do elétron**

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2} = m\frac{\mathrm{v}^2}{r} = F \Rightarrow m\mathrm{v}^2 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}$$

Dada a **energia potencial de um elétron atômico**, **se movendo em uma das órbitas possíveis**, por:

$$\mathrm{V} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}$$

$$\mathrm{v} \equiv \text{velocidade do elétron em sua órbita}$$

$$\mathrm{r} \equiv \text{o raio da órbita}$$

Sendo, $r = 4\pi\varepsilon_0\dfrac{n^2\hbar^2}{Ze^2 m}$ obtido a partir da **quantização do momento angular**

e da **condição de órbita circular acima**. Mostre que a **quantização do momento angular orbital do elétron** implica na **quantização de sua energia total.**

$$E = K + V = -\frac{mZ^2e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \qquad (\mathrm{n} = 1,2,3\ldots)$$

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2} = m\frac{\mathrm{v}^2}{r} = F \Rightarrow$$

$$m\mathrm{v}^2 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r} \quad \text{e} \quad \frac{1}{2}m\mathrm{v}^2 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{2r}$$

v ≡ velocidade do elétron em sua órbita

r ≡ o raio da órbita

$$E = K + V = \frac{1}{2}m\mathrm{v}^2 + \left(-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)$$

$$E = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{2r} + \left(-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right) = -\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 2r}\right) \Leftarrow \boxed{r = 4\pi\varepsilon_0 \frac{n^2\hbar^2}{Ze^2 m}}$$

$$E = -\frac{mZ^2e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \quad (\mathrm{n} = 1,2,3...)$$

POSTULADOS DE BOHR

1. Um elétron em um átomo se move em uma órbita circular em torno do núcleo sob influência da atração coulombiana entre o elétron e o núcleo. obedecendo às Leis da Mecânica Clássica.

2. No lugar da infinidade de órbitas que seriam possíveis, segundo a Mecânica Clássica, um elétron só pode se mover em uma órbita na qual seu momento angular orbital "L" é um múltiplo inteiro de "ħ" (a constante de Planck "h" dividida por 2π.

3. Apesar de estar constantemente acelerado, um elétron que se move em uma dessas órbitas possíveis não emite radiação eletromagnética. Portanto sua energia total *"E"* permanece constante

4. É emitida radiação eletromagnética se um elétron, que se move inicialmente sobre uma órbita de energia total *"Ei"*, muda seu movimento descontinuamente de forma a se mover em uma órbita de energia total *"Ef"*.

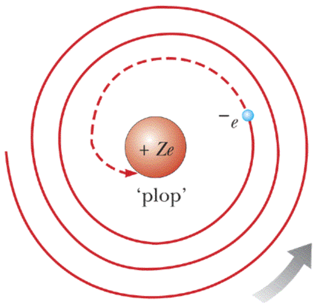
- A frequência da radiação emitida "f" é igual à quantidade (Ei-Ef) dividida pela constante de Planck "h".

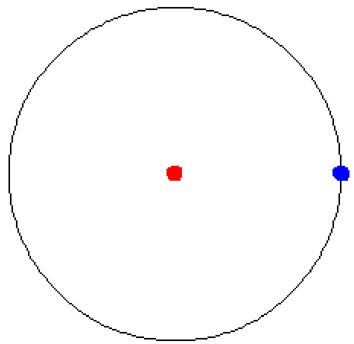
POSTULADOS DE BOHR

3. Apesar de estar constantemente acelerado, um elétron que se move em uma dessas órbitas possíveis não emite radiação eletromagnética. Portanto sua energia total *“E”* permanece constante.

Este postulado **elimina o problema da estabilidade de um elétron se movendo em uma órbita circular**, devido à **emissão de radiação eletromagnética pelo elétron exigida pela teoria clássica**, **simplesmente postulando que essa <u>característica da teoria clássica não é válida para o caso de um elétron atômico.</u>**

Serway/Jewett; Principles of Physics, 3/e
Figure 29.3





O postulado se baseia no fato experimental de que os átomos são estáveis, mesmo que isso não seja previsto pela teoria clássica.

POSTULADOS DE BOHR

4. É emitida radiação eletromagnética se um elétron, que se move inicialmente sobre uma órbita de energia total *"Ei"*, muda seu movimento descontinuamente de forma a se mover em uma órbita de energia total *"Ef"*.

- A frequência da radiação emitida "f" é igual à quantidade (Ei-Ef) dividida pela constante de Planck "h".

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

Este postulado é na realidade o postulado de Einstein, de que a frequência de um fóton de radiação eletromagnética é igual à energia carregada pelo fóton dividida pela constante de Planck.