Investigando o mundo quântico: de átomos a líquidos

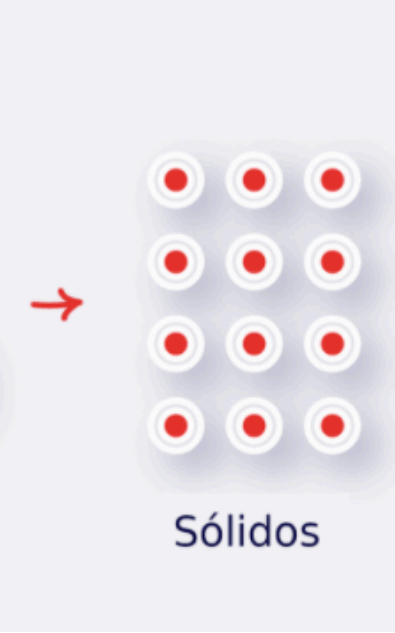
Luana S. Pedroza

UFABC - Brazil

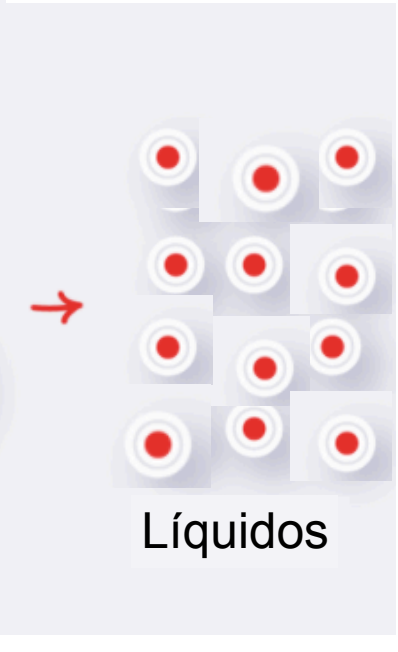
Max Planck Tandem Group

l.pedroza@ufabc.edu.br

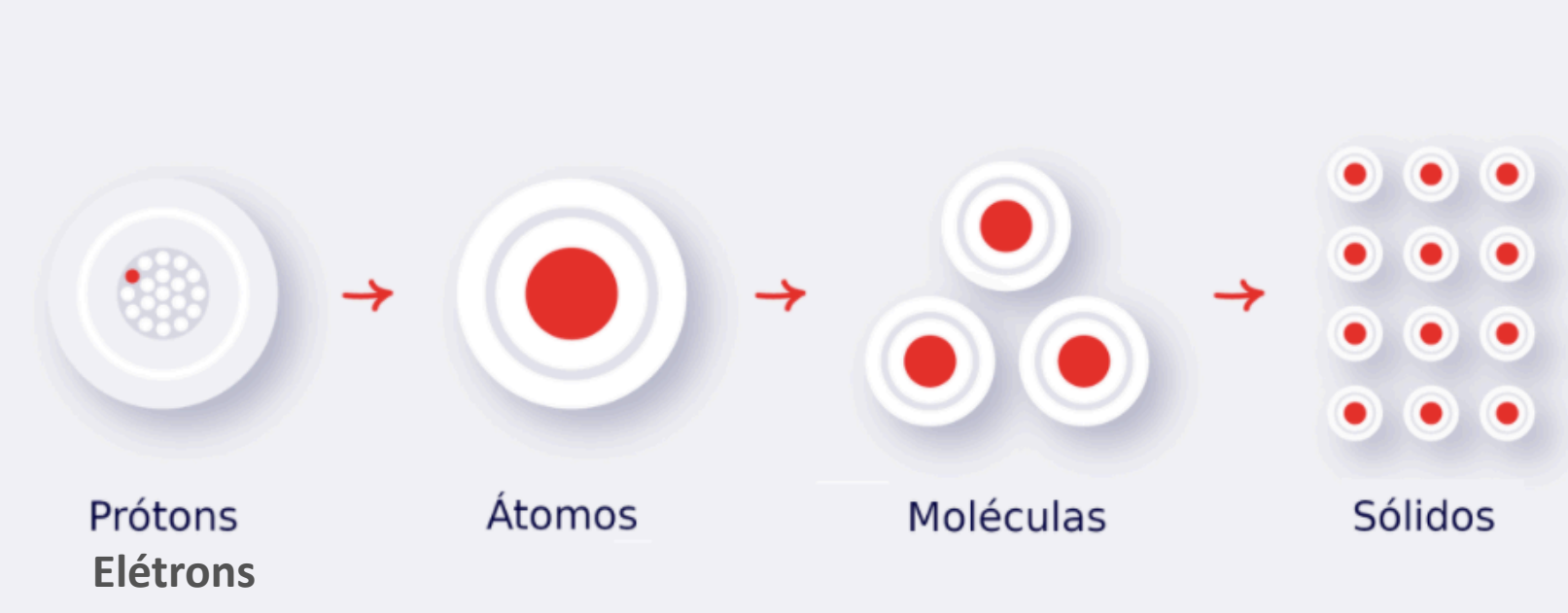
Objetivo



Objetivo



Objetivo

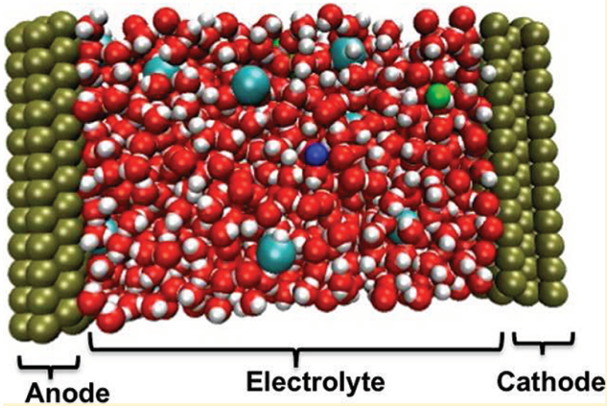


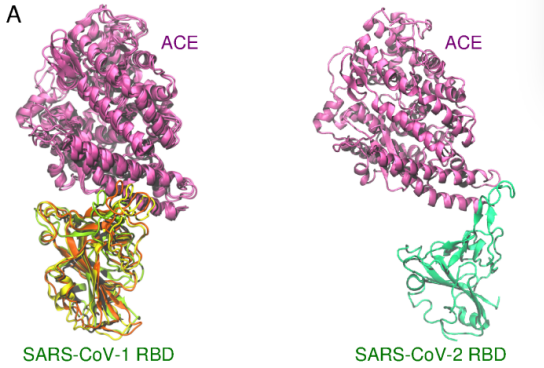
$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\overrightarrow{r},t)}{\partial t} = \widehat{H}\Psi(\overrightarrow{r},t)$$

Objetivo

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\vec{r},t)$$

+





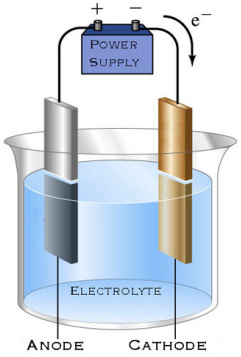


Tabela periódica

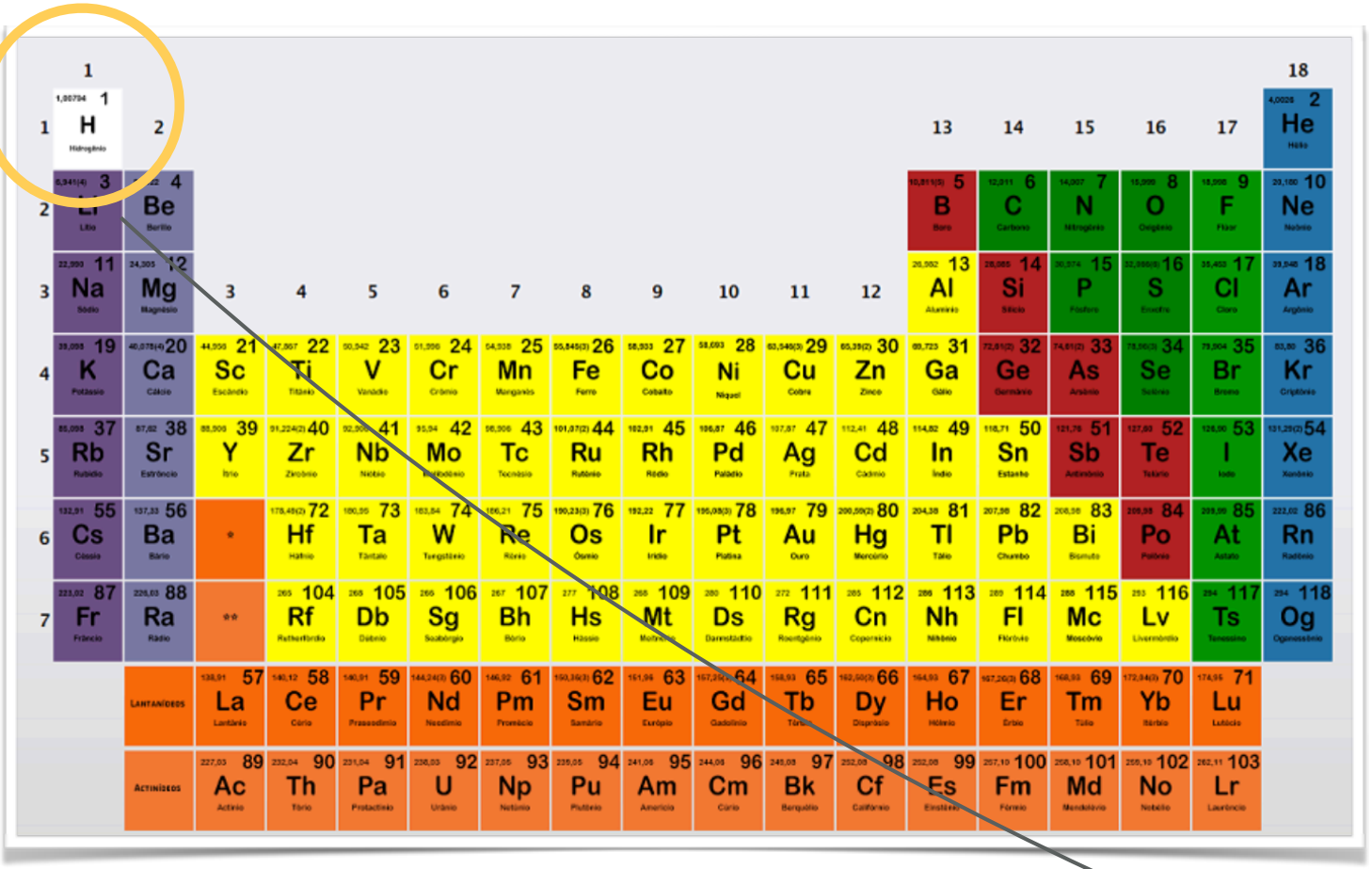
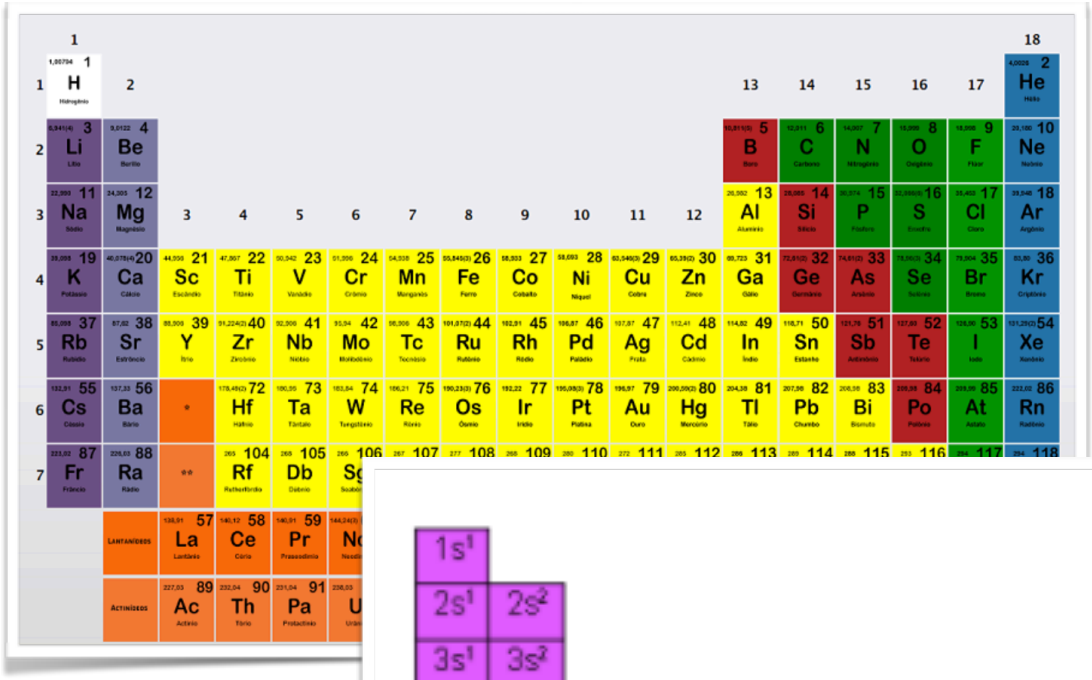
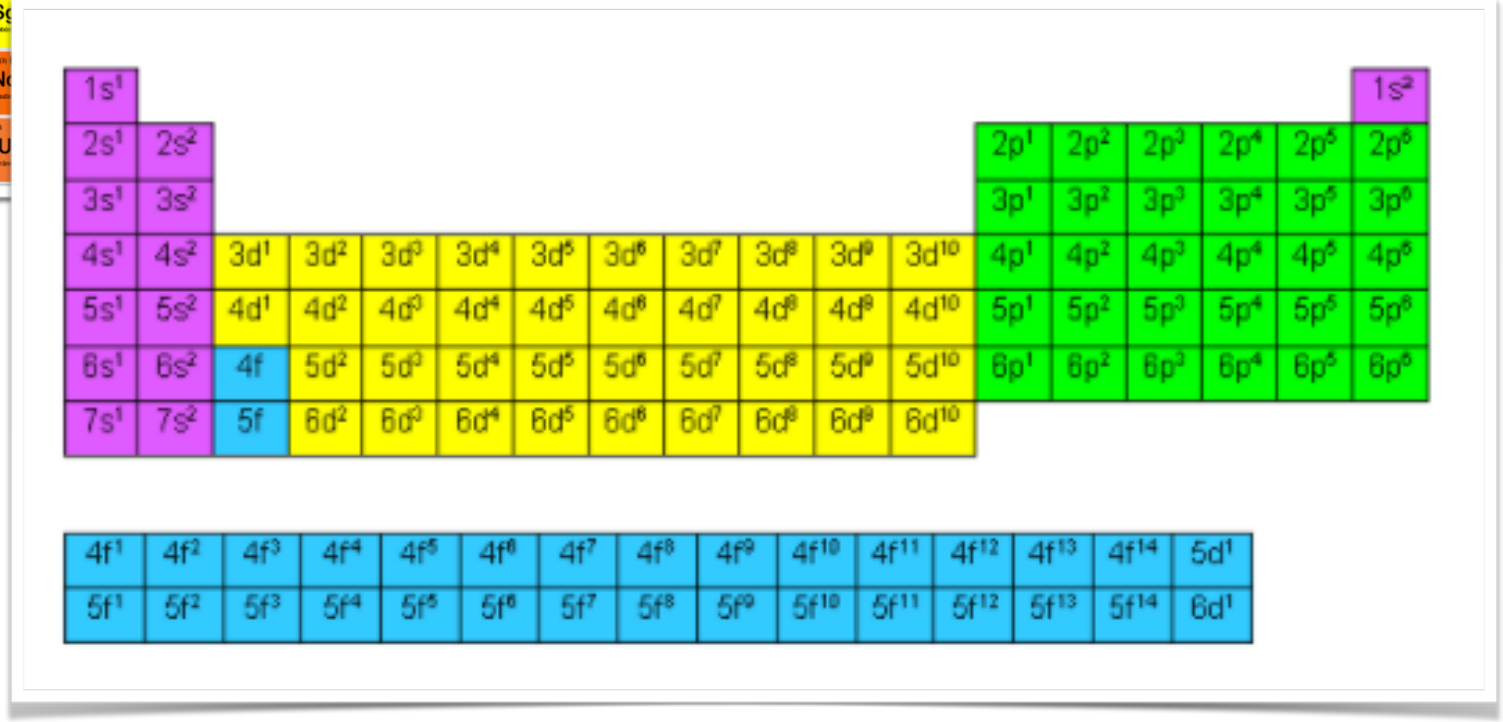
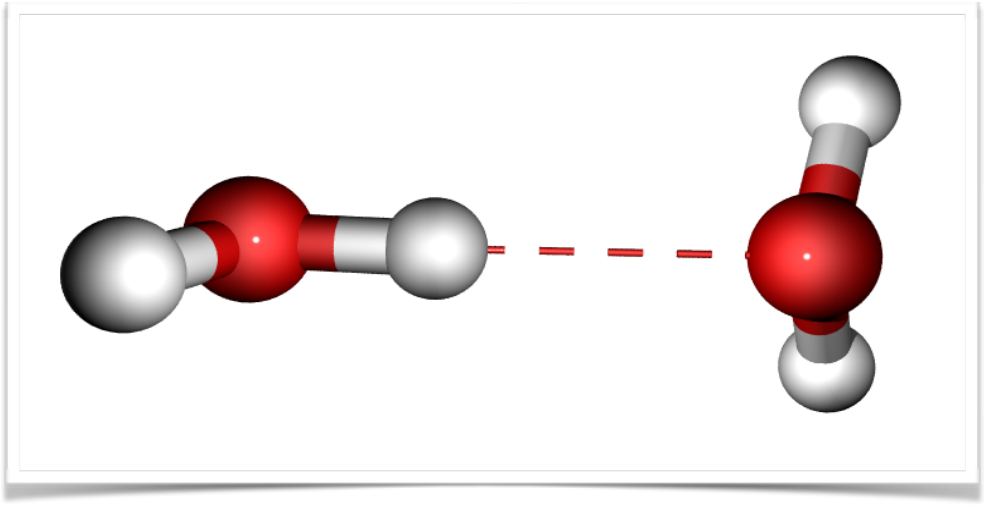


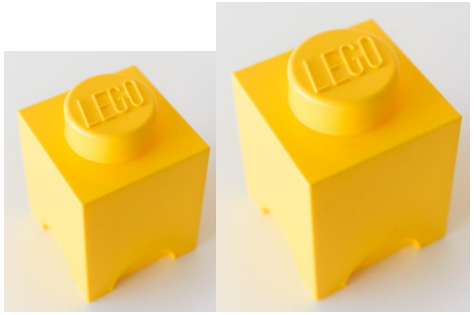
Tabela periódica



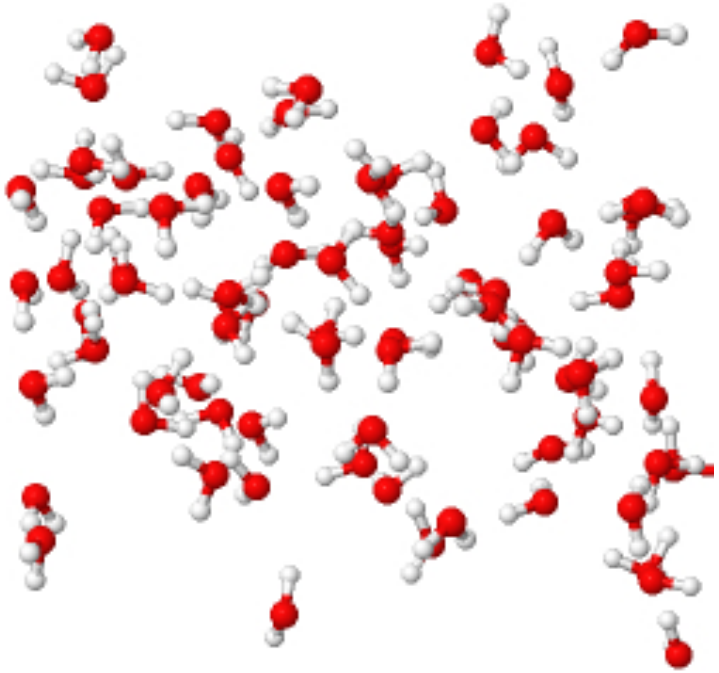


Ligação de hidrogênio



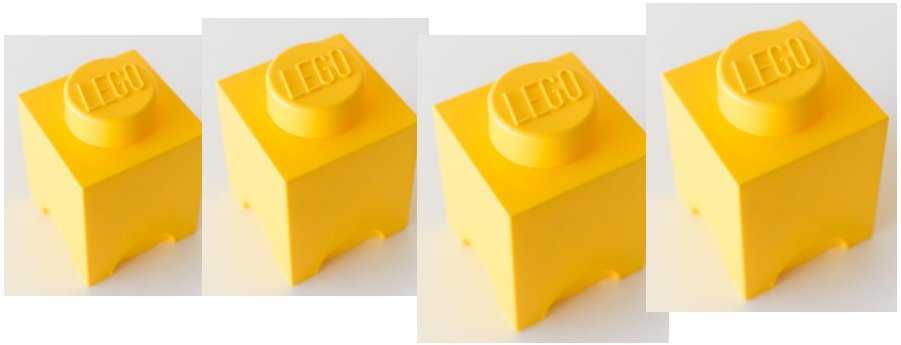


Líquidos

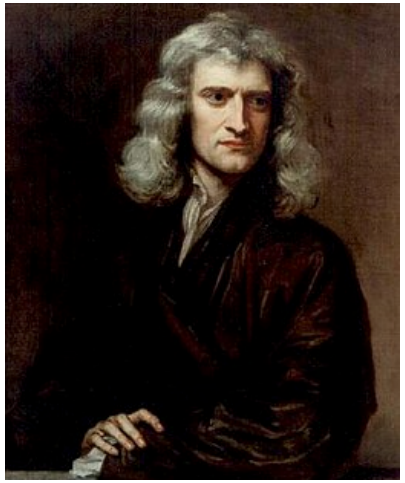


Dinâmica Molecular

Machine Learning



SÉCULO XIX

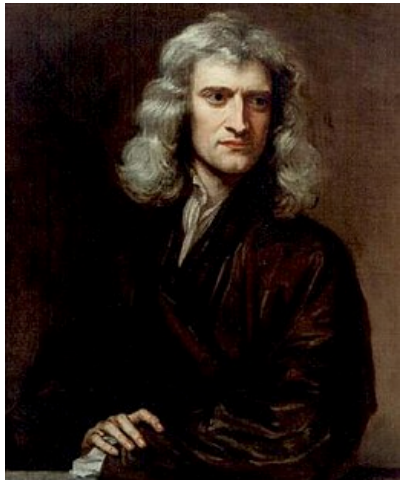


Newton

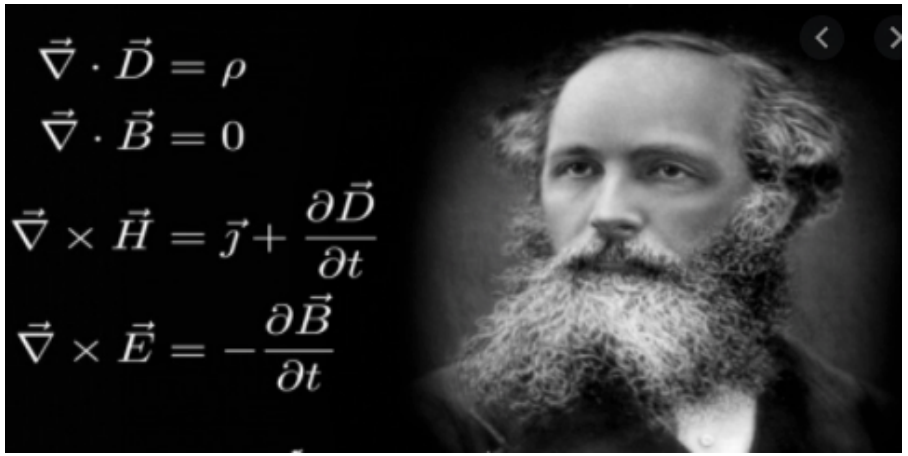
EXEMPLO

- A velocidade de um carro, que viaja com uma aceleração constante, muda de 6 m/s para 22 m/s em um intervalo de 5 minutos (300 s). Qual é a distância (em metros) que o carro percorre neste intervalo de tempo?

SÉCULO XIX



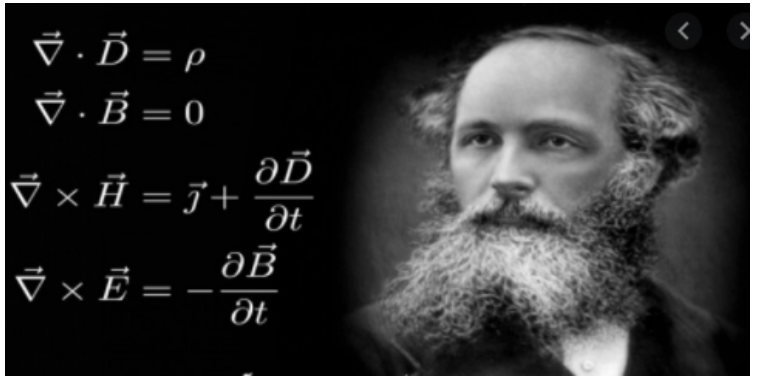
Newton



Maxwell

SÉCULO XIX

Newton



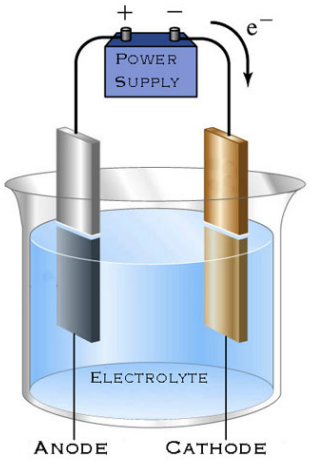
Maxwell

École Polytechnique	Glasgow school	Berlin school	Edinburgh school
Sadi Carnot (1796-1832)	William Thomson (1824-1907)	Rudolf Clausius (1822-1888)	James Maxwell (1831-1879)
Vienna school	**Gibbsian school**	**Dresden school**	**Dutch school**
Ludwig Boltzmann (1844-1906)	Willard Gibbs (1839-1903)	Gustav Zeuner (1828-1907)	Johannes van der Waals (1837-1923)

SÉCULO XIX

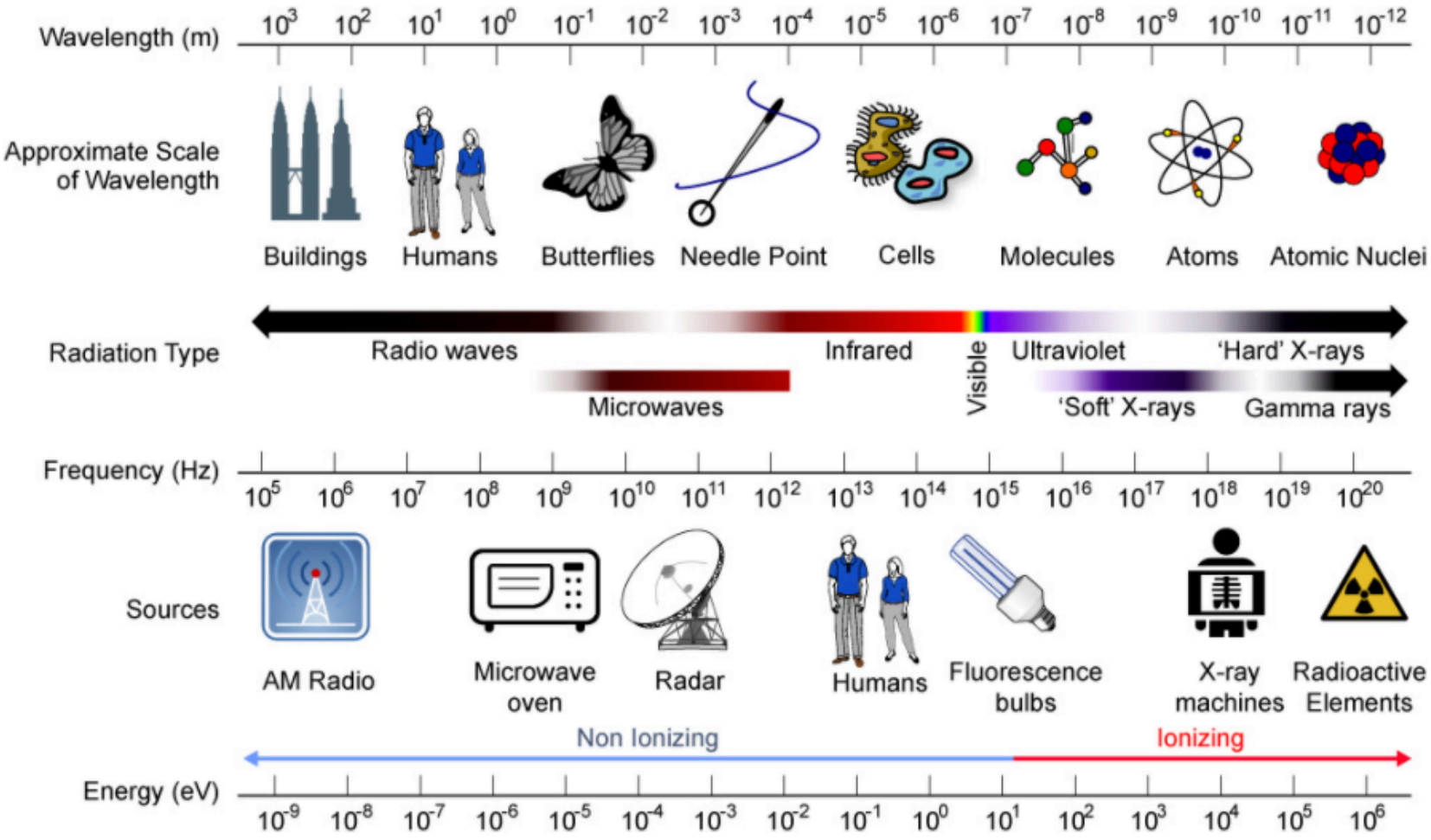
Mecânica clássica

Eletromagnetismo



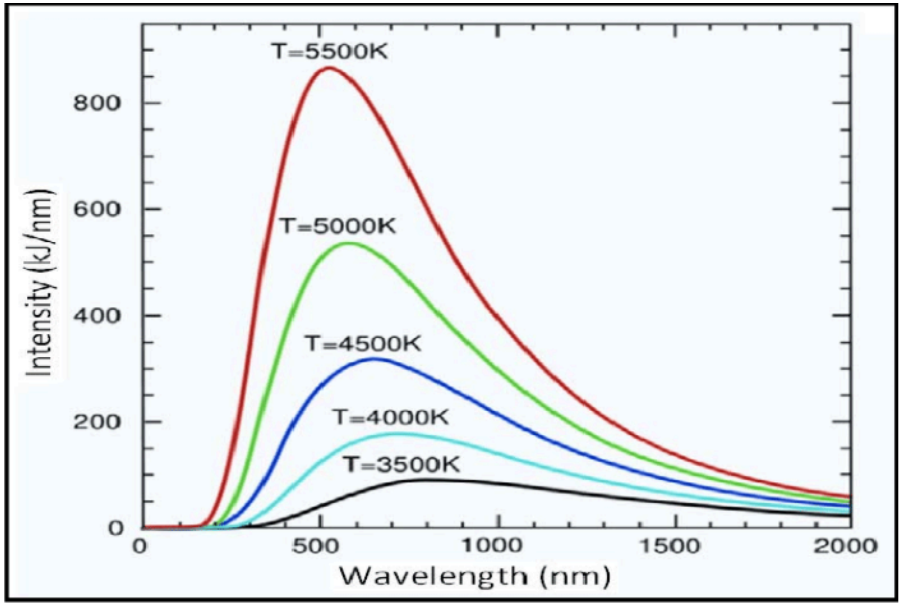
Termodinâmica

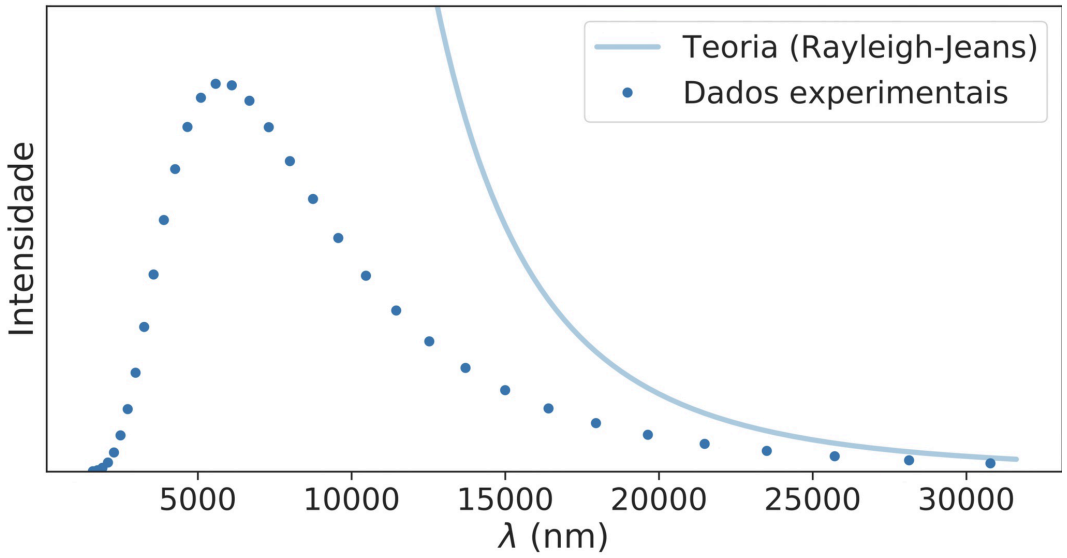
ESCALA


Wavelength (m)
10^{3} 10^{2} 10^{1} 10^{0} 10^{-1} 10^{-2} 10^{-3} 10^{-4} 10^{-5} 10^{-6} 10^{-7} 10^{-8} 10^{-9} 10^{-10} 10^{-11} 10^{-12}
Approximate Scale of Wavelength
Buildings
Humans
Butterflies
Needle Point
Cells
Molecules
Atoms
Atomic Nuclei
Radiation Type
Radio waves
Microwaves
Infrared
Visible
Ultraviolet
'Soft' X-rays
'Hard' X-rays
Gamma rays
Frequency (Hz)
10^{5} 10^{6} 10^{7} 10^{8} 10^{9} 10^{10} 10^{11} 10^{12} 10^{13} 10^{14} 10^{15} 10^{16} 10^{17} 10^{18} 10^{19} 10^{20}
Sources
AM Radio
Microwave oven
Radar
Humans
Fluorescence bulbs
X-ray machines
Radioactive Elements
Non Ionizing
Ionizing
Energy (eV)
10^{-9} 10^{-8} 10^{-7} 10^{-6} 10^{-5} 10^{-4} 10^{-3} 10^{-2} 10^{-1} 10^{0} 10^{1} 10^{2} 10^{3} 10^{4} 10^{5} 10^{6}

EVIDÊNCIAS EXPERIMENTAIS

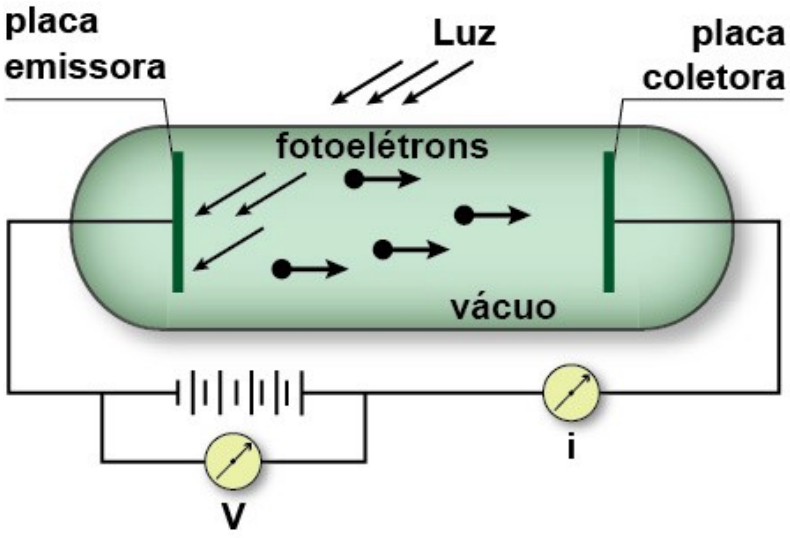
- Radiação corpo negro

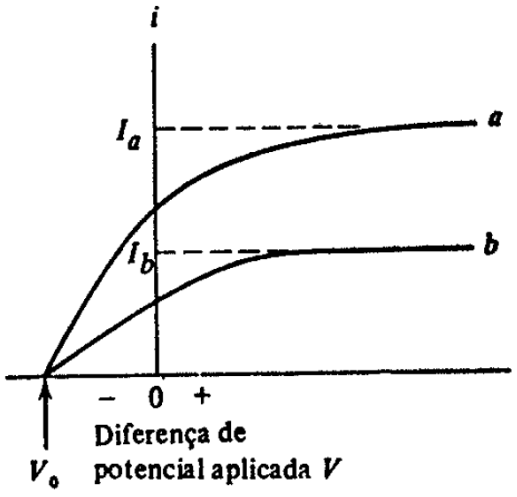


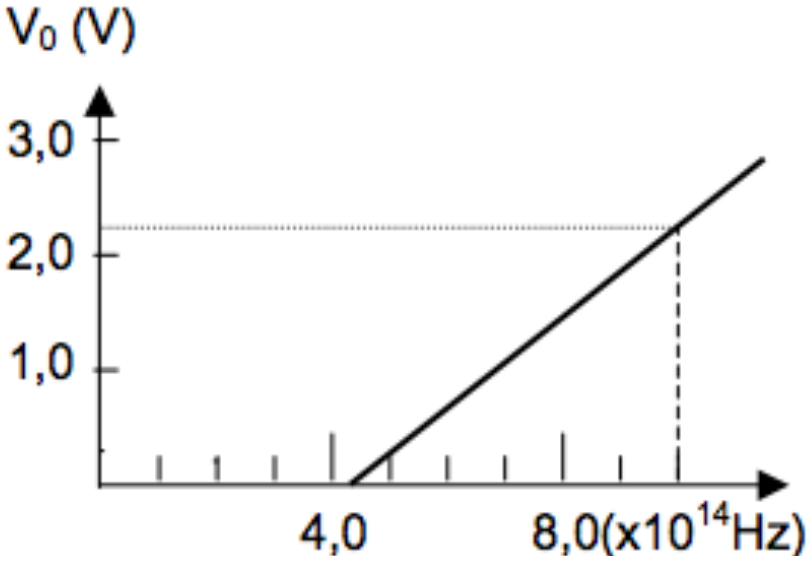


EVIDÊNCIAS EXPERIMENTAIS

- Efeito fotoelétrico







IDEIA ATÔMICA

- Proust (1801): lei das proporções definidas
- Dalton (1808): lei das proporções múltiplas
- Gay-Lussac (1808): lei dos volumes
- Avogadro (1811): número de Avogadro
- Mendeleev (1869): tabela periódica
- Faraday (1833): eletrólise
- Boltzmann (1870): teoria cinética dos gases e termodinâmica

MODELOS ATÔMICOS

Modelo de Rutherford (1911)

MODELOS DE RUTHERFORD

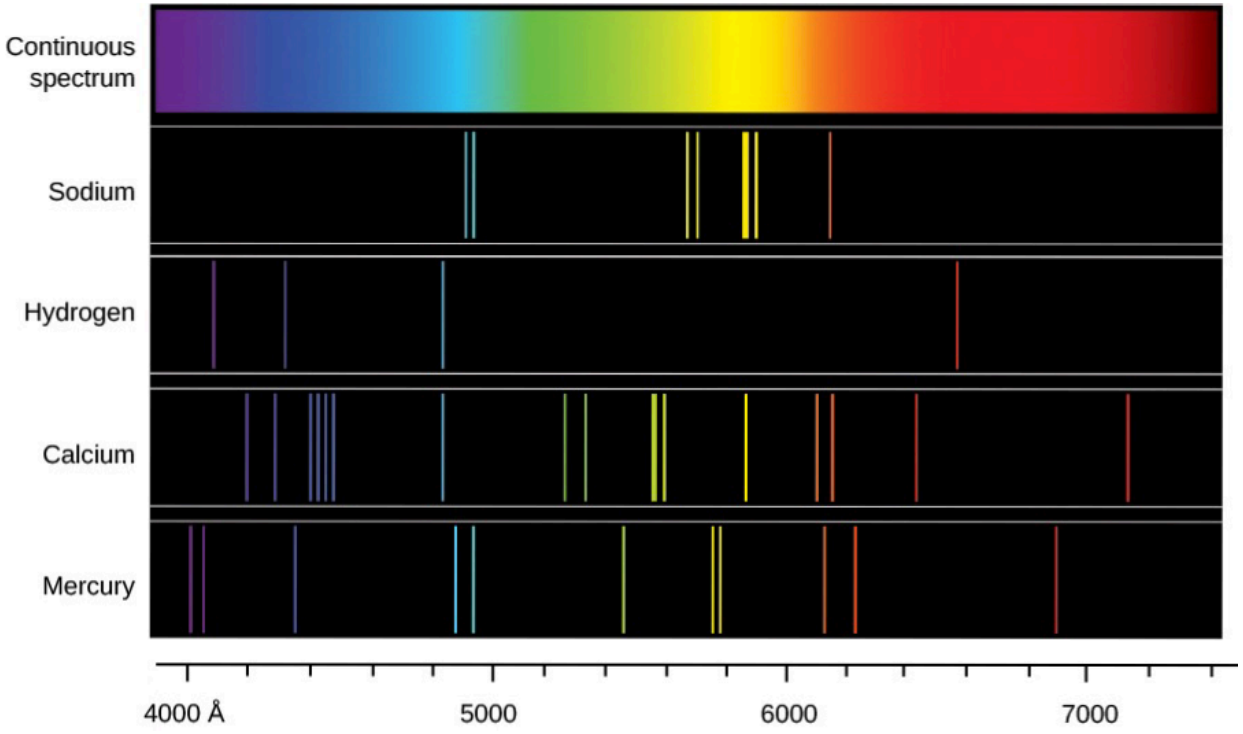
Consequências do modelo de Rutherford:

- espectro contínuo da radiação
- instabilidade do átomo

MODELOS ATÔMICOS

Evidências experimentais:

- átomo é estável
- átomos emitem e absorvem radiação em frequências específicas



ÁTOMO DE HIDROGÊNIO

MODELO DE BOHR (1913)

Postulados:

1 - Os elétrons de um átomo só podem existir em estados estacionários, onde os valores de energia são bem definidos e discretos; não há emissão ou absorção enquanto estão nesses estados

2 - Ocorre emissão ou absorção quando o sistema efetua transição de um estado para outro

3 - Existe uma relação quantitativa entre a frequência da radiação absorvida/emitida e a diferença de energia dos dois estados estacionários

MODELO DE BOHR (1913)

Problemas:

- previa as linhas espectrais, mas não suas intensidades
- falhava para átomos mais pesados
- era incapaz de explicar a interação com o campo magnético
- não se aplicava a fenômenos que dependiam do tempo

EXEMPLO

Considere que o momento angular da Terra devido ao seu movimento ao redor do Sol é quantizado de acordo com o postulado de Bohr ($L = n\hbar$). Nesse caso, qual seria o valor de n? Esta quantização poderia ser detectada? Justifique sua resposta. Considere que a órbita terrestre é circular, a massa da Terra é $M = 6 \times 10^{24}$ kg, o raio da órbita terrestre é $R = 1,5 \times 10^{11}$ m e a velocidade orbital terrestre é 30 km/s.

EXEMPLO

Ex: Um elétron com 3,0 eV de energia é capturado por um núcleo do átomo de Hélio. No processo, um fóton de 2,4 Å é emitido. Considerando o modelo de Bohr, para qual nível de energia o elétron foi capturado?

EVIDÊNCIAS EXPERIMENTAIS

- Espectros
- Radiação corpo negro
- Efeito fotoelétrico
- Efeito compton

O QUE FAZER?

O QUE FAZER?

NOVA TEORIA: MECÂNICA QUÂNTICA

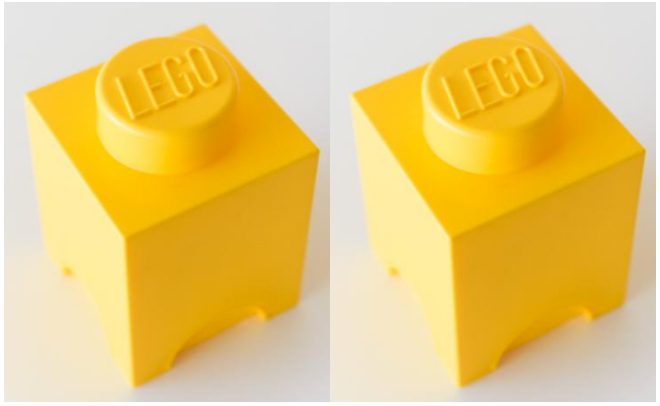
MECÂNICA QUÂNTICA - POSTULADOS

• O estado físico de um sistema é descrito pela função de onda, que contém toda a informação sobre o sistema.

MECÂNICA QUÂNTICA - POSTULADOS

- A evolução temporal de um sistema é dada pela solução da equação de Schrödinger dependente do tempo:

próxima semana



links

https://phet.colorado.edu/sims/html/blackbody-spectrum/latest/blackbody-spectrum_pt_BR.html
https://phet.colorado.edu/en/simulation/photoelectric
https://phet.colorado.edu/en/simulation/legacy/hydrogen-atom