

Um passeio pelos conceitos de Mecânica Quântica

Alexandre Reily Rocha

alexandre.reily@unesp.br

[@iftunesp](#)

[@alexandrereily](#)

Retomando a aula passada

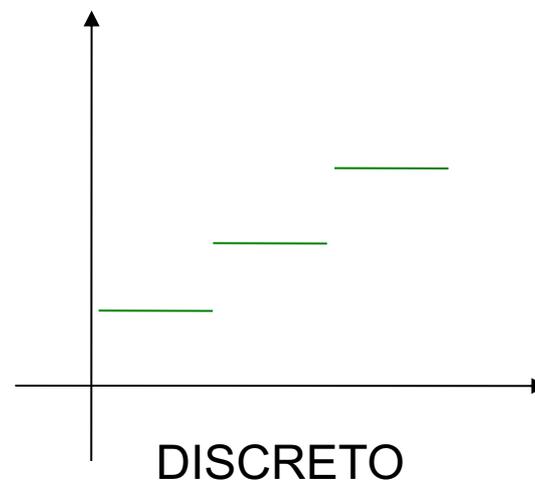
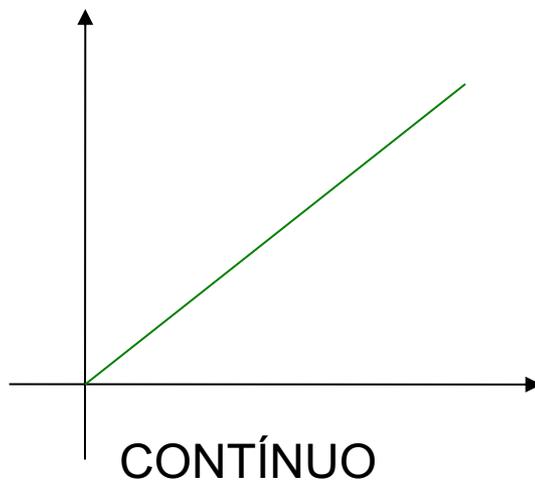


Teoria de Planck



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

A energia de um sistema não é uma variável contínua. A energia somente pode assumir alguns valores específicos, ou seja, ela é discreta ou quantizada.



Através da Lei da Radiação de Planck pode-se chegar a Lei de Stefan e Wien!

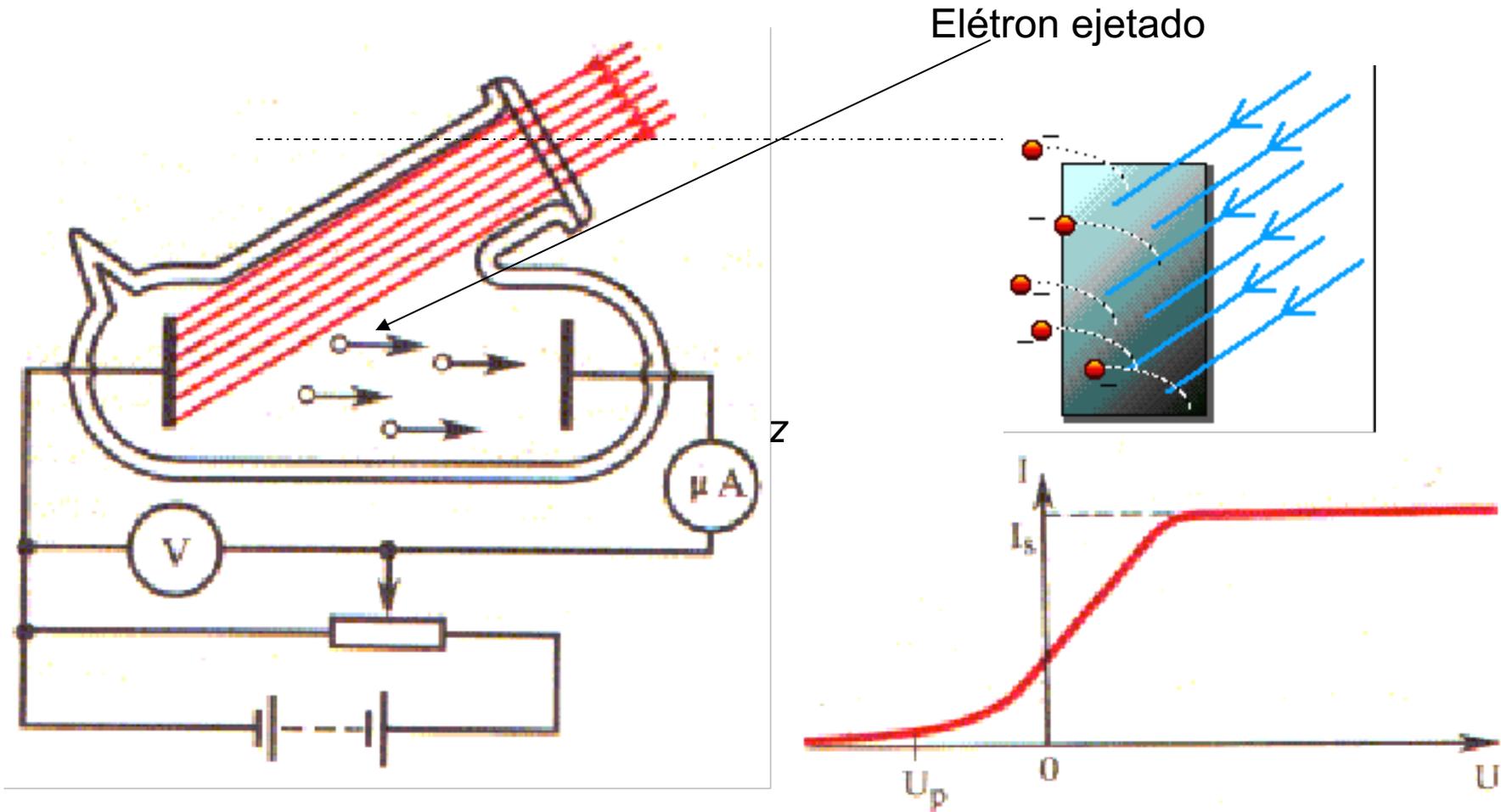
$$E = hf$$

$$B_{\lambda}(T) = \frac{2c^2}{\lambda^5} \frac{h}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}$$

Efeito Fotoelétrico - Experimento de Hertz



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



Originalmente observado por Hertz em 1887

Efeito Fotoelétrico



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

•Equação de Einstein

Potencial de frenamento

$$\left(\frac{1}{2}mv^2\right) = eV_0 = hf - W$$

Energia cinética
do elétron

“chute”

W = função trabalho
(energia necessária para
“arrancar” o elétron)
característica do material



Mas é só isso?



Retornando a 1808

Os modelos para o átomo



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

Dalton:
"Bola de bilhar"



O átomo é uma
esfera maciça,
indivisível, neutra.

1803



J. Dalton (1766-1844)

Os átomos como esferas neutras

- Todo elemento químico é composto por átomos.
- Todos os átomos de um mesmo elemento apresentam as mesmas propriedades.
- Átomos de diferentes elementos apresentam propriedades químicas diferentes.
- Durante uma reação química, nenhum átomo de determinado elemento desaparece.
ou se transforma em átomo de outro elemento.
- Substâncias compostas são formados por átomos de mais de um elemento
- Em um dado composto os números relativos de átomos são definidos.
- Quando dois elementos se unem para formar uma substância composta, apenas um átomo de cada elemento se combinam.



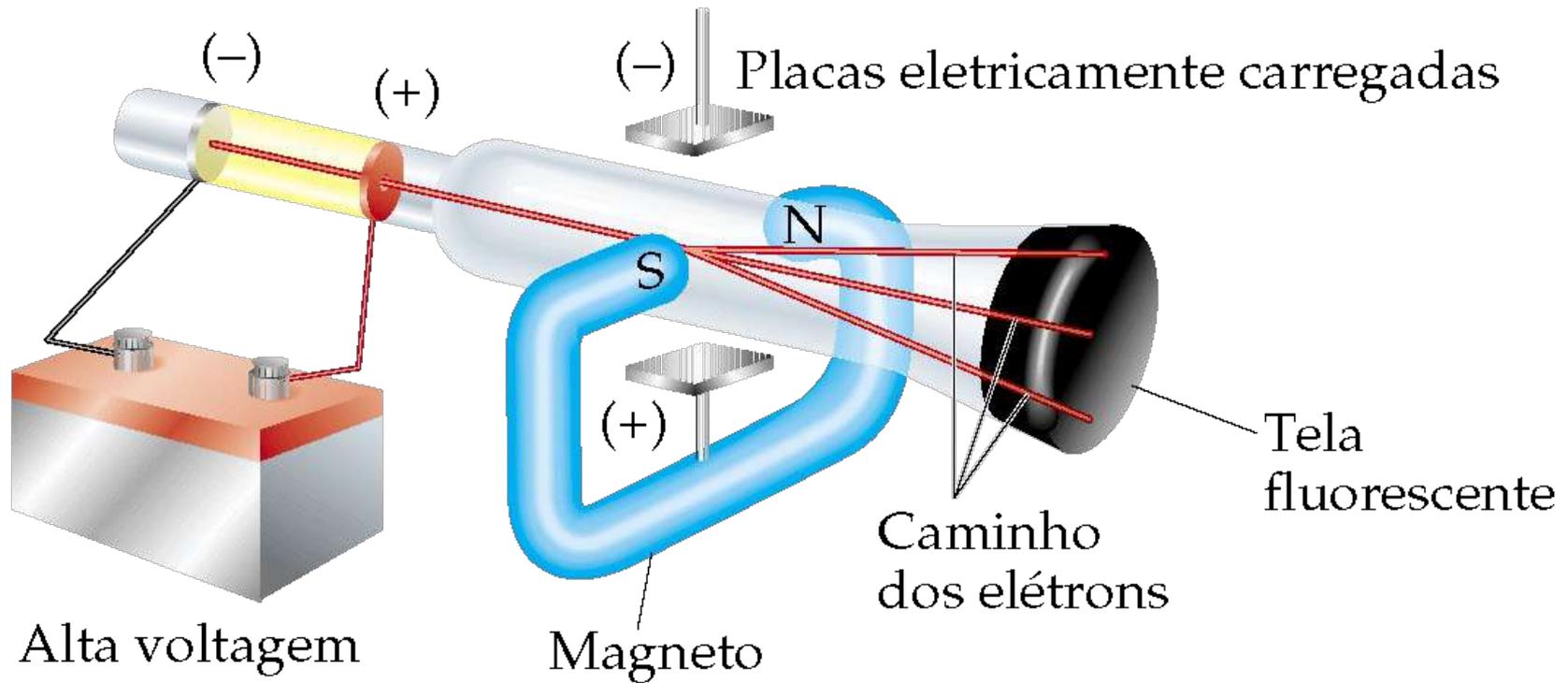
Um átomo sem carga?

A descoberta da estrutura atômica



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

Raios catódicos e elétrons



Os modelos para o átomo



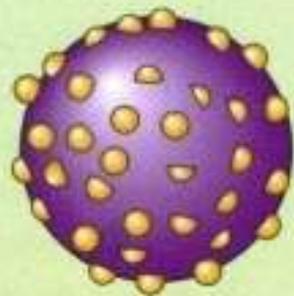
IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

Dalton:
"Bola de bilhar"



O átomo é uma esfera maciça, indivisível, neutra.

Thomson:
"Pudim de passas"



O átomo é uma esfera maciça, positiva com elétrons encravados nela.

1803



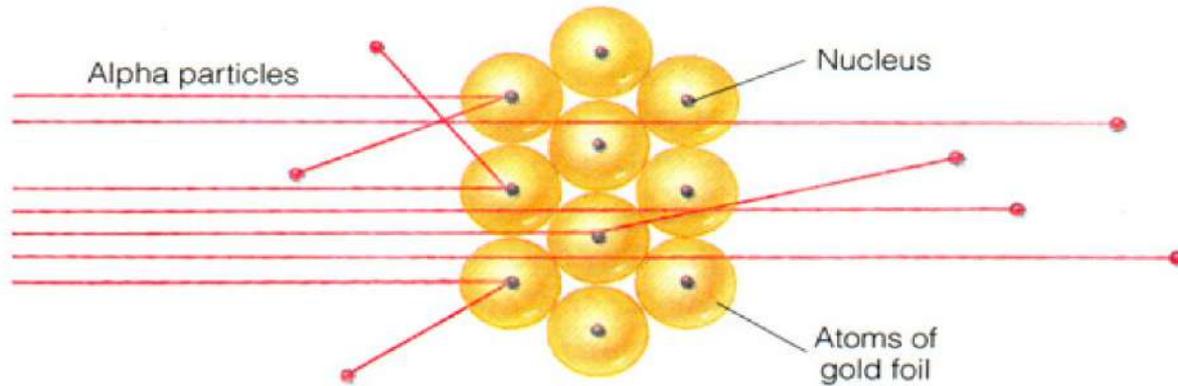
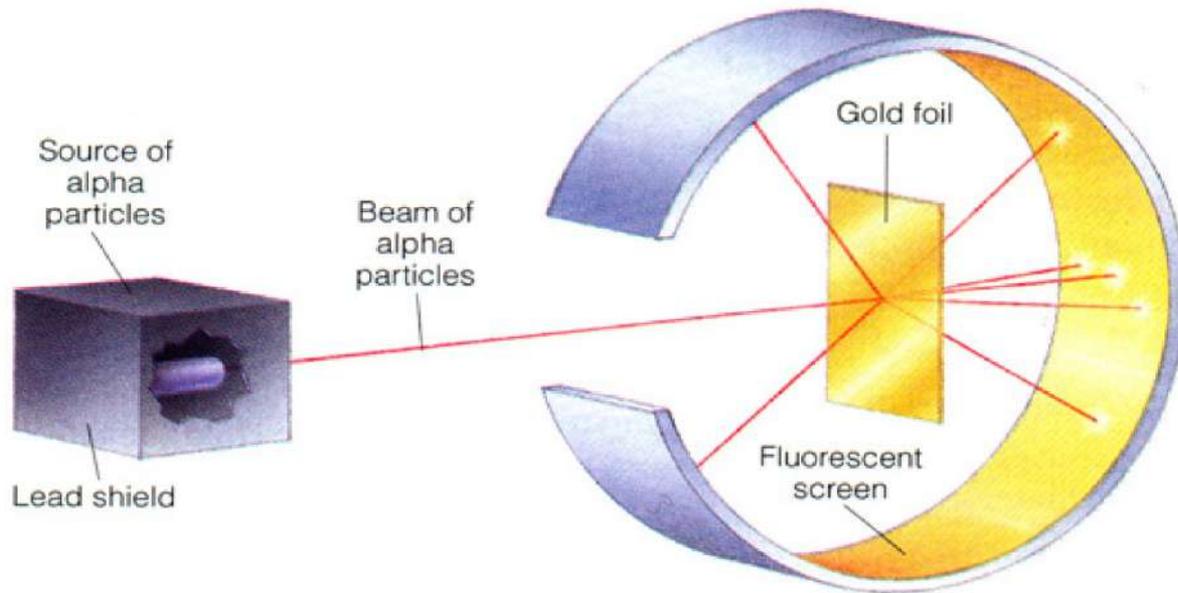
J. Dalton (1766-1844)

1897



J. J. Thomson (1856-1940)

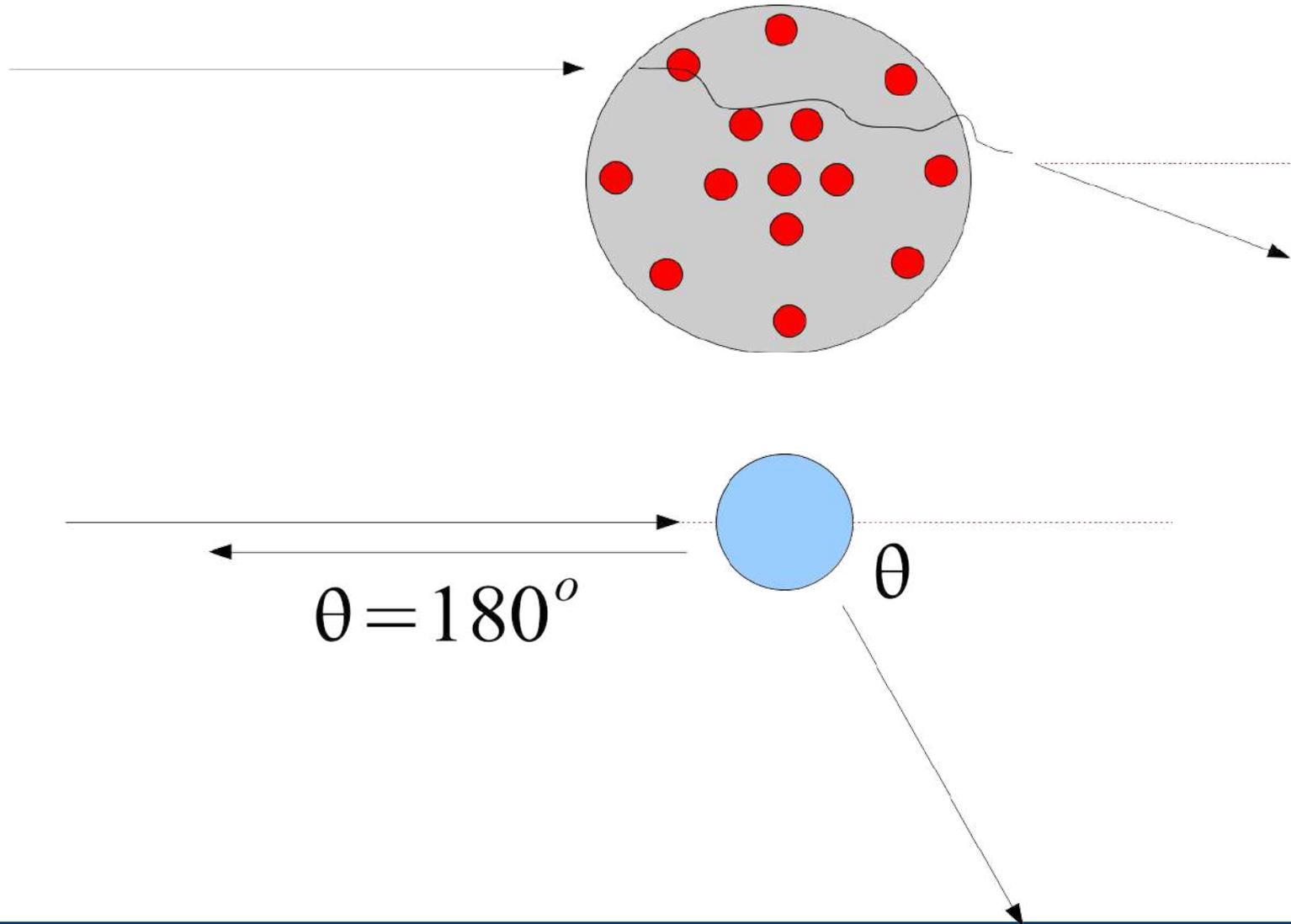
Mais um experimento



Expectativa vs. realidade



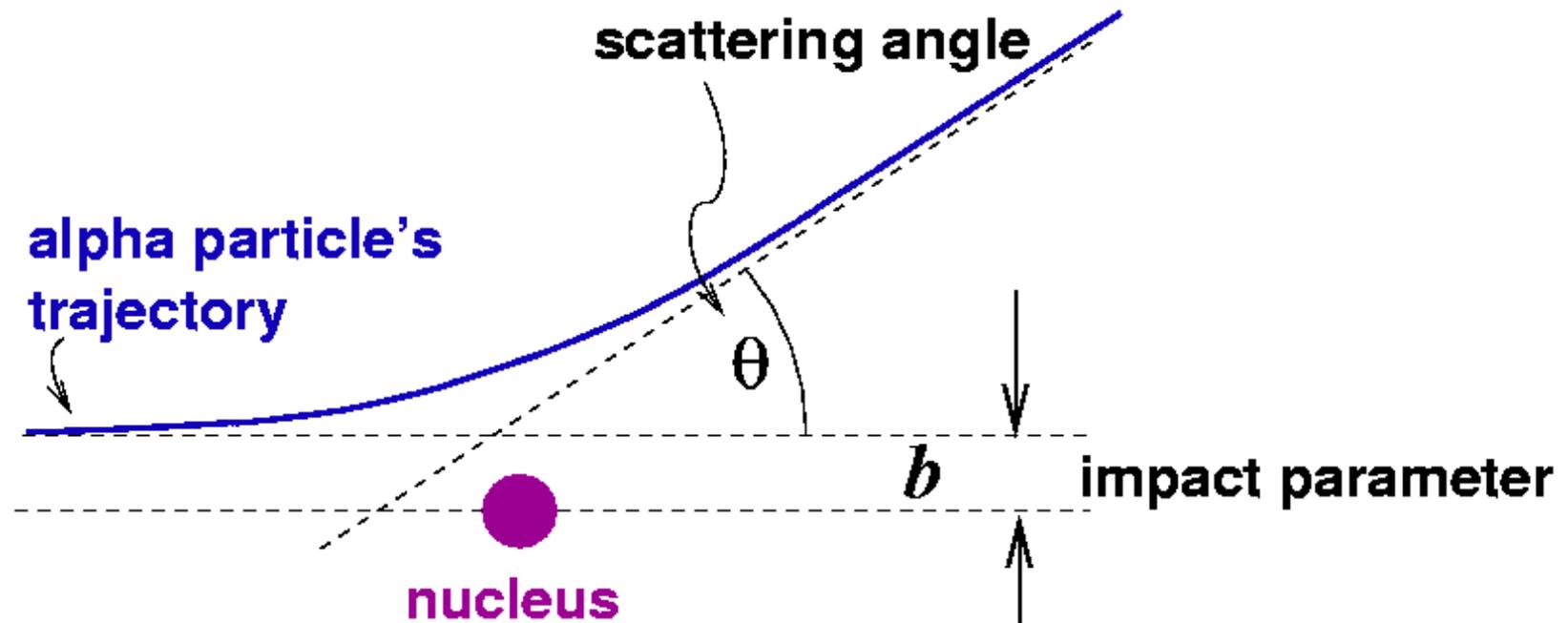
IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



A explicação



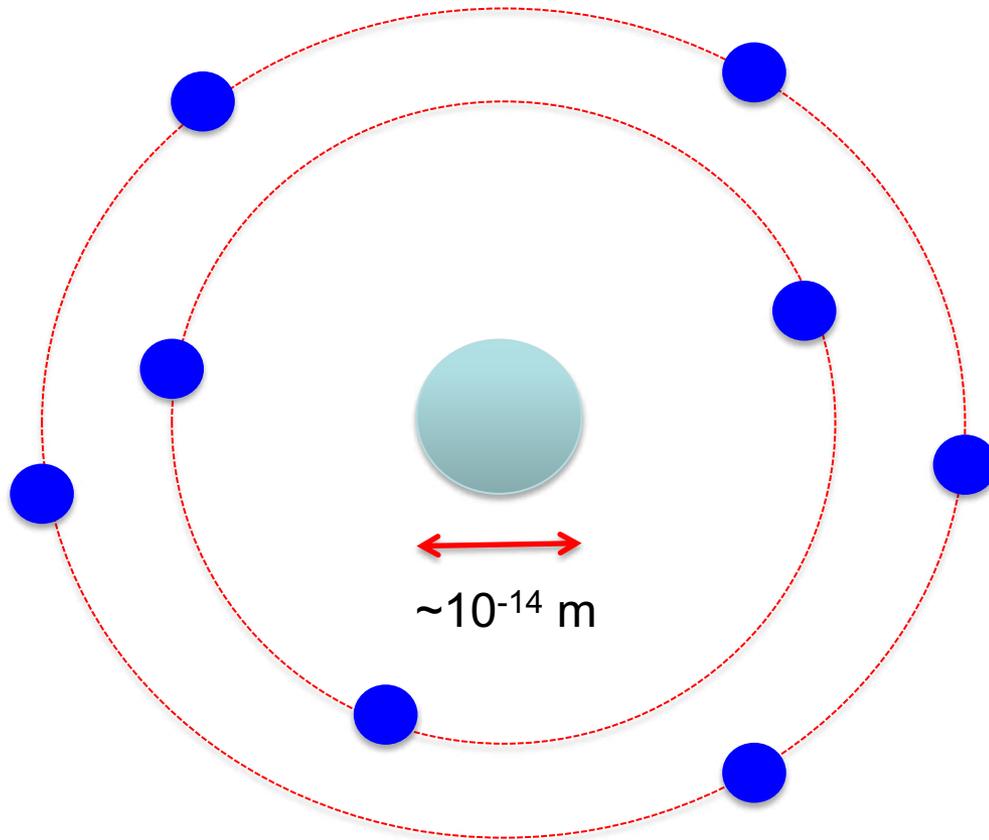
IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



O átomo de Rutherford?



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



- Núcleo de carga Z rodeado por Z elétrons (modelo planetário).
- Quase toda a massa concentrada no núcleo
- Tamanho do núcleo $\sim 10^{-14}$ m

Os modelos para o átomo



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

Dalton:
"Bola de bilhar"



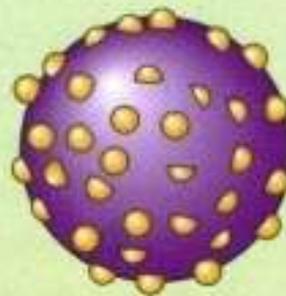
O átomo é uma esfera maciça, indivisível, neutra.

1803



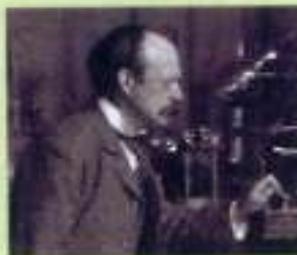
J. Dalton (1766-1844)

Thomson:
"Pudim de passas"



O átomo é uma esfera maciça, positiva com elétrons encravados nela.

1897



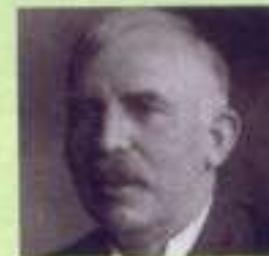
J. J. Thomson (1856-1940)

Rutherford:
"Modelo planetário"



O átomo tem um núcleo positivo e muito pequeno ao redor do qual giram os elétrons.

1911



E. Rutherford (1871-1937)

Linha do tempo

Um modelo planetário simples?



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

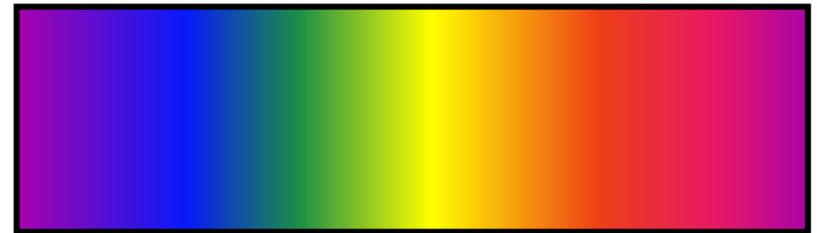
Voltemos à luz!

A natureza da luz



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

- Issac Newton (1643-1727): Em 1665, demonstrou que a luz branca, como a luz do Sol, ao passar por um prisma se decompõe em luz de diferentes cores, formando um espectro como o arco-íris.



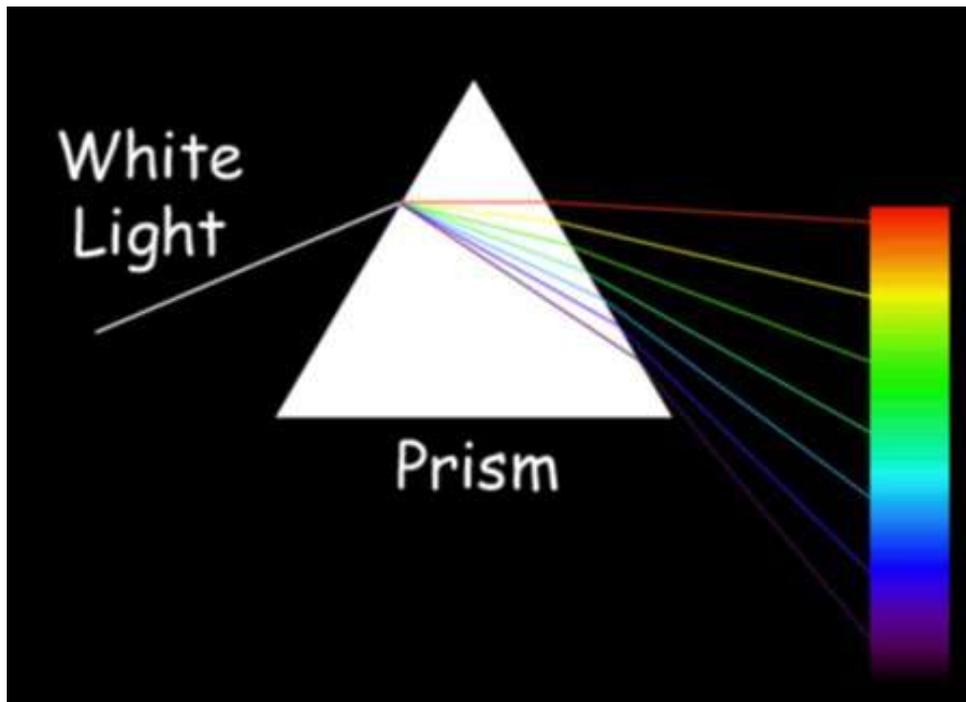
Tela

A natureza da luz



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

Porque a luz se separava no prisma?

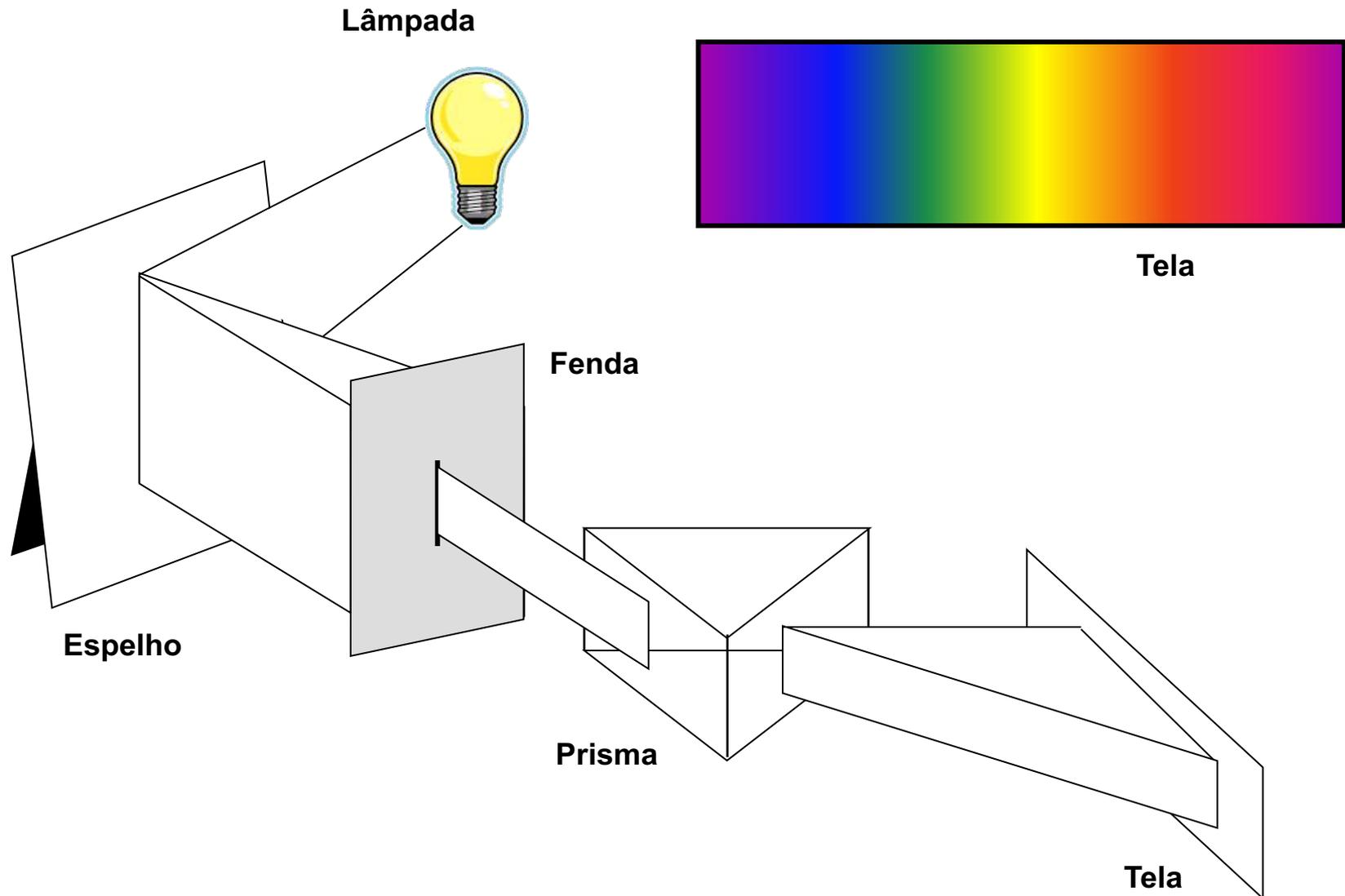


 The picture can't be displayed.

A natureza da luz



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

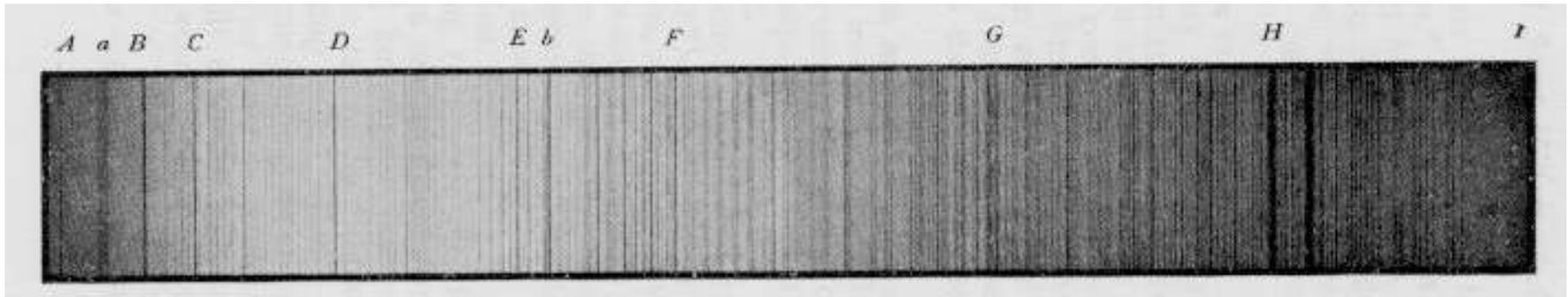


Nem todas as cores aparecem



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

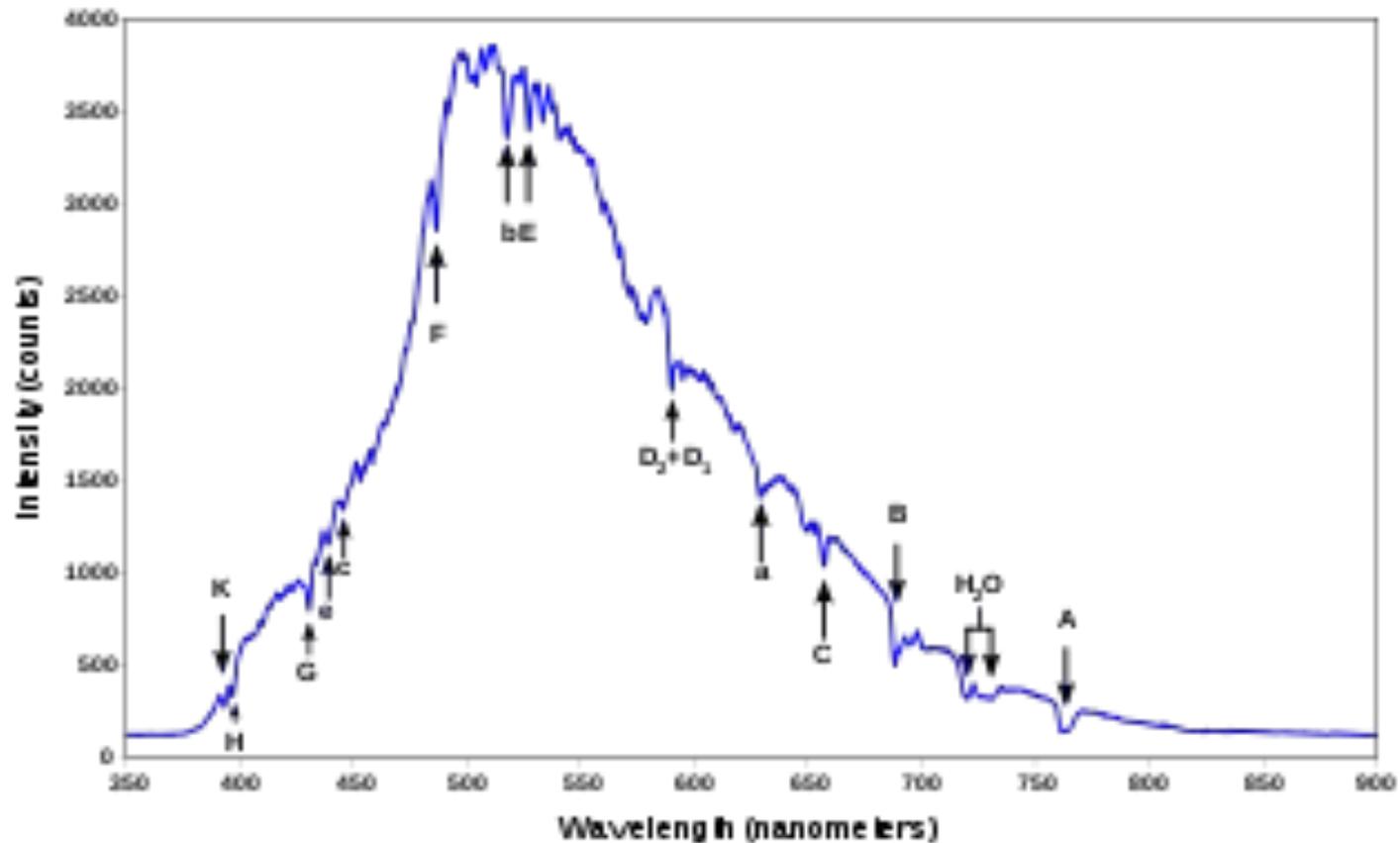
- William Hyde Wollaston (1766-1828): Em 1802, observou que passando a luz por uma fenda, e depois por um prisma, apareciam algumas linhas escuras no espectro, que ele interpretou como o limite das cores.
- Joseph von Fraunhofer (1787-1826): Até 1826, esse fabricante de instrumentos de vidro, já havia contado 574 linhas escuras no espectro solar, chamadas depois de **linhas de Fraunhofer**.



A linhas de Fraunhofer



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



Mas só há linhas faltando?

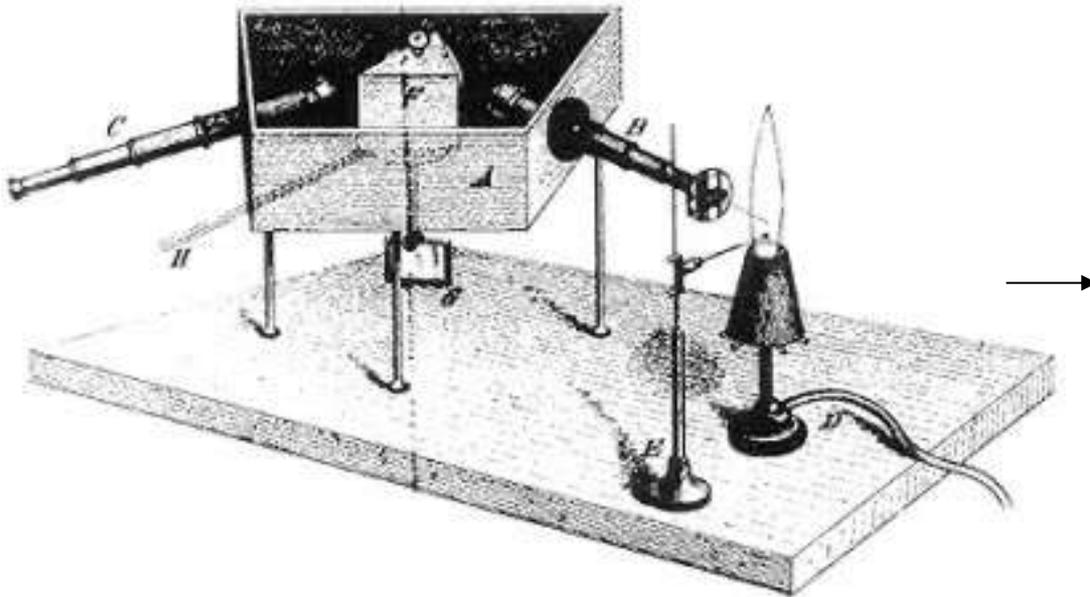


IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

- Em 1856, Robert Wilhelm Bunsen (1811-1899) inventou o bico de gás (conhecido hoje como bico de Bunsen).

Quando um elemento químico era colocado sobre a chama, a chama adquiria uma certa coloração

- Nesse mesmo ano, Gustav Robert Kirchhoff sugeriu que as cores seriam melhor identificadas se passadas através de um prisma.



Kirchhoff e Bunsen descobrem que cada elemento apresenta uma série de linhas diferentes.

Exemplos:

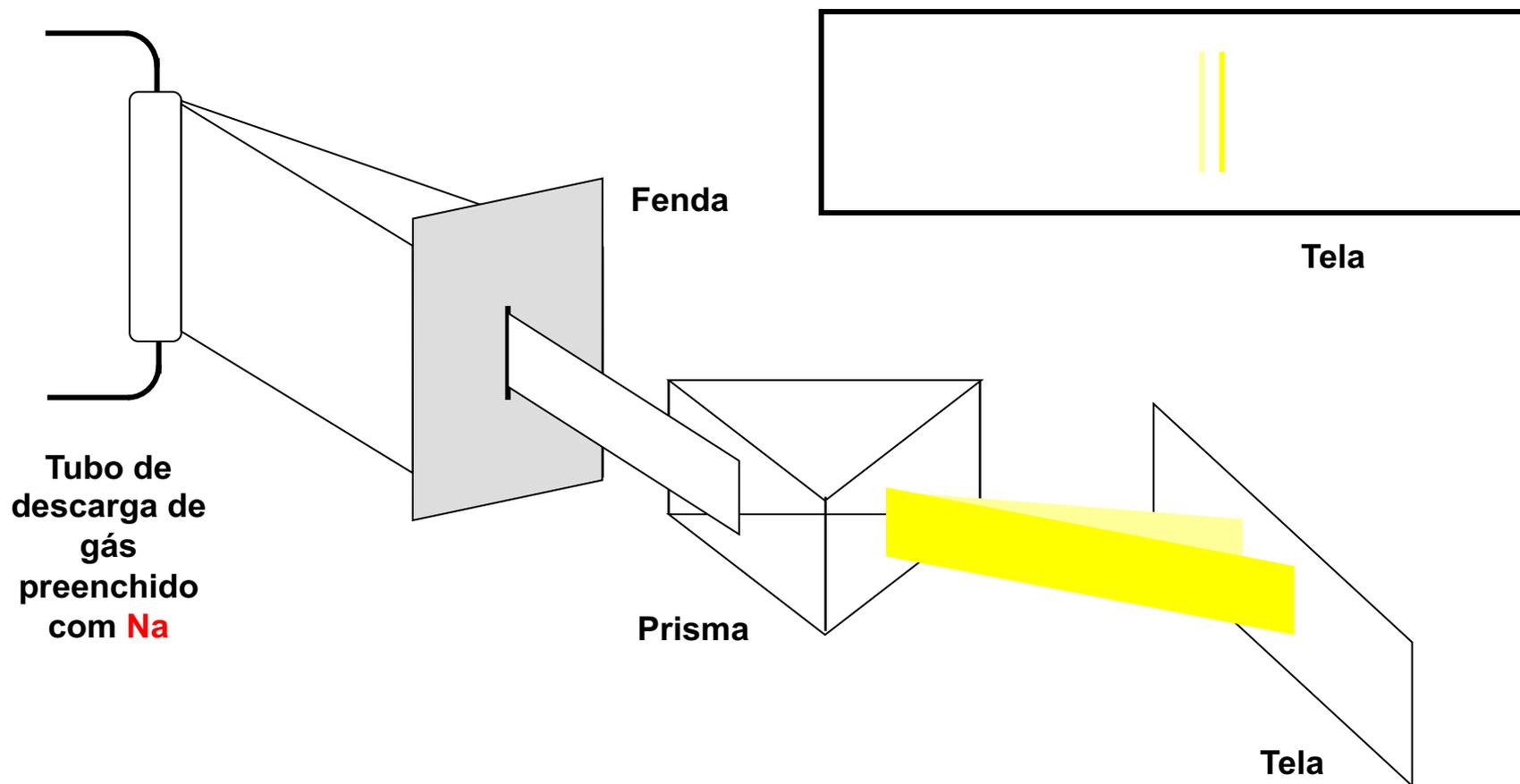
Oxigênio, Vermelho
Sódio, Amarelo
Hidrogênio, Verde
Ferro, Azul
Cálcio, Violeta

Emissão atômica



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

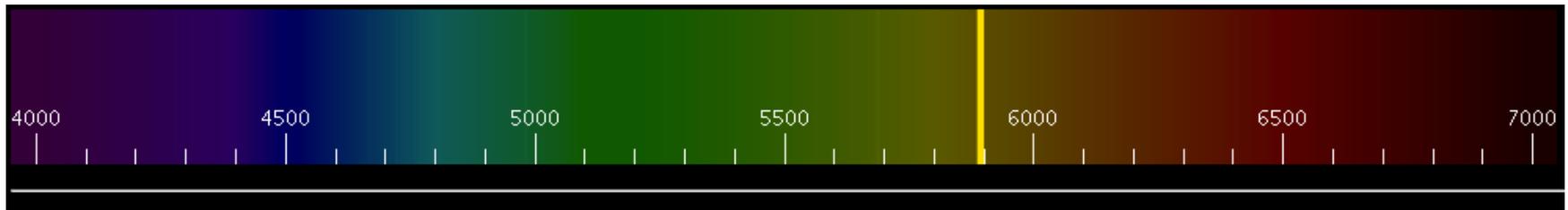
- Cada átomo, quando submetido à altas temperaturas ou a uma descarga elétrica, emite radiação eletromagnética em frequências características ou cada átomo apresenta um espectro característico



Espectro do Sódio



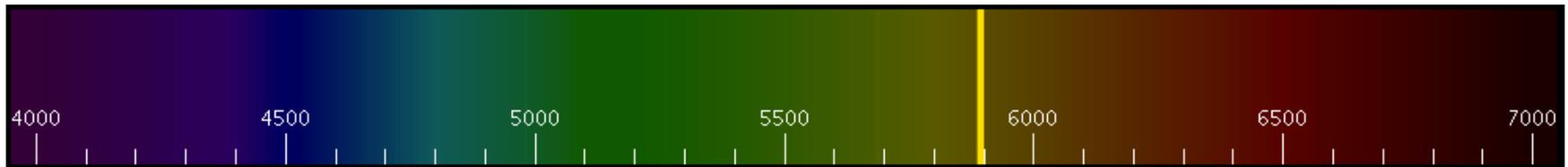
IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



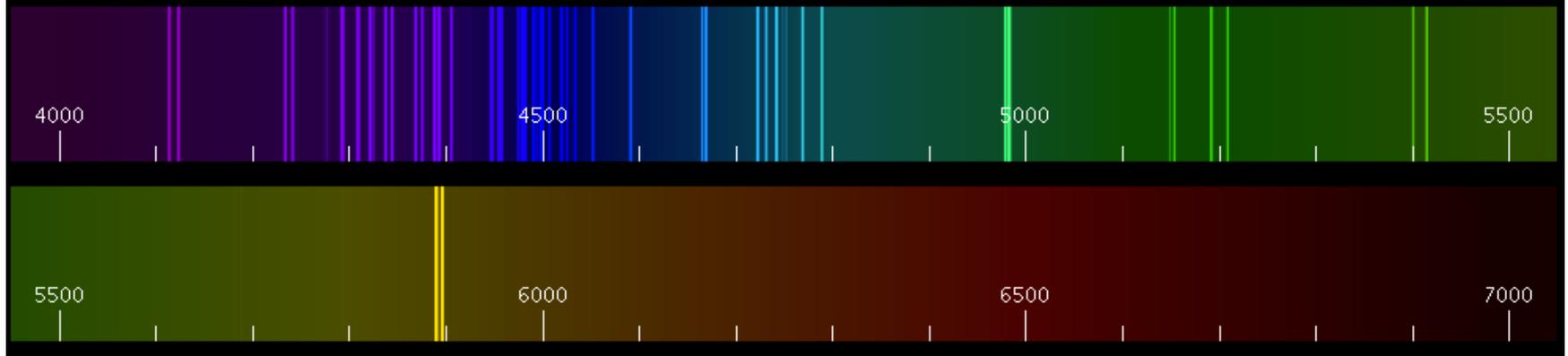
Espectro do Sódio



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



The spectrum in two parts:



Leis de Kirchhoff



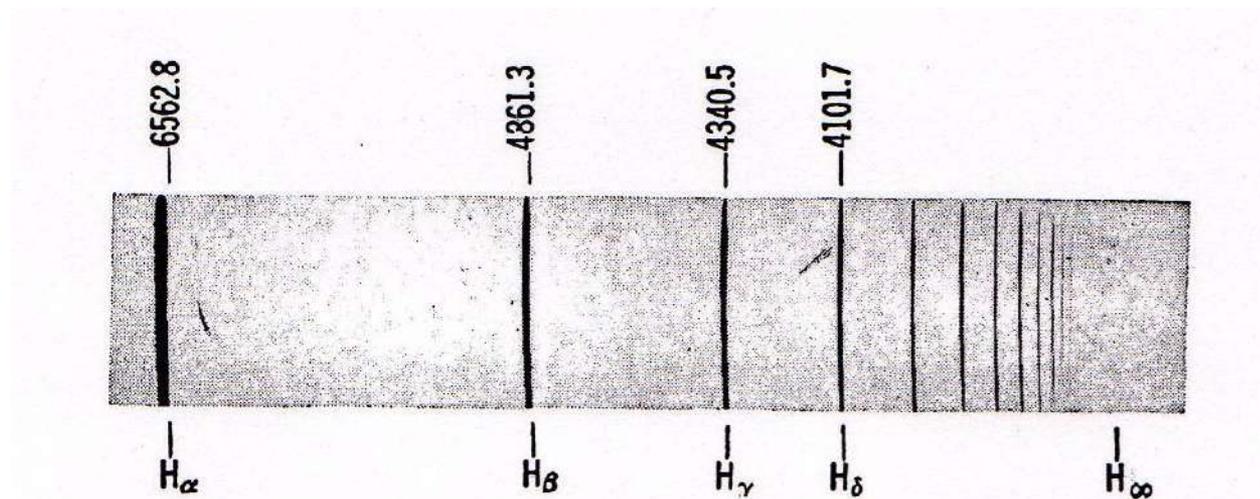
- 1) Um corpo opaco quente, sólido, líquido ou gasoso, emite um espectro contínuo.
- 2) Um gás transparente produz um espectro de linhas de emissão. O número e a posição das linhas depende dos elementos químicos presentes no gás.
- 3) Se um espectro contínuo passar por um gás à temperatura mais baixa, o gás frio provoca o aparecimento de linhas escuras na tela. O número e a posição destas linhas depende também dos elementos químicos presentes no gás.

Emissão atômica



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

- O espectro atômico é característico dos átomos envolvidos. Dessa forma, é razoável suspeitar que o espectro atômico depende da distribuição eletrônica do átomo.
- Cientistas buscavam encontrar um padrão nos comprimentos de onda (ou frequência) das linhas atômicas no espectro do hidrogênio.



Espectro de emissão do átomo de hidrogênio na região do visível e ultravioleta próximo. A letra H_x representa a posição da radiação.

Balmer (1885)



- Mostrou que a frequência da radiação emitida pelo átomo de hidrogênio na região do visível / ultravioleta-próximo depende de $1/n^2$.

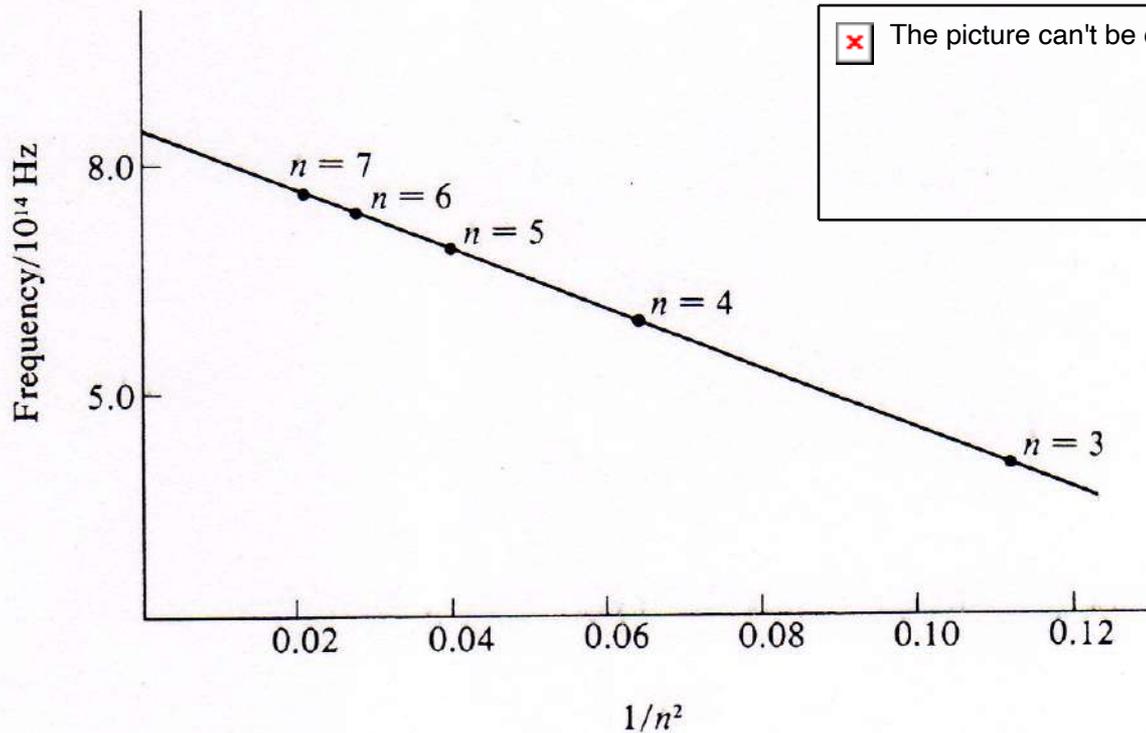
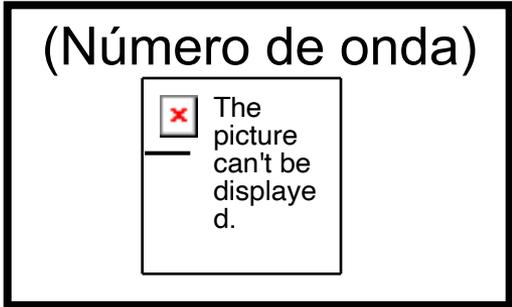
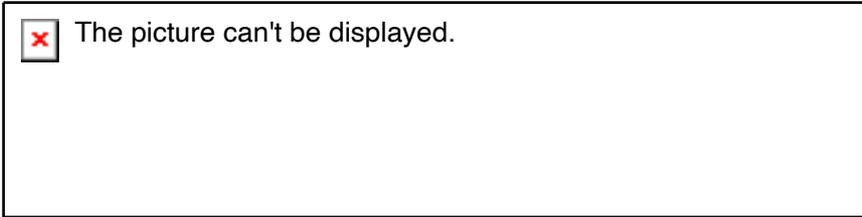


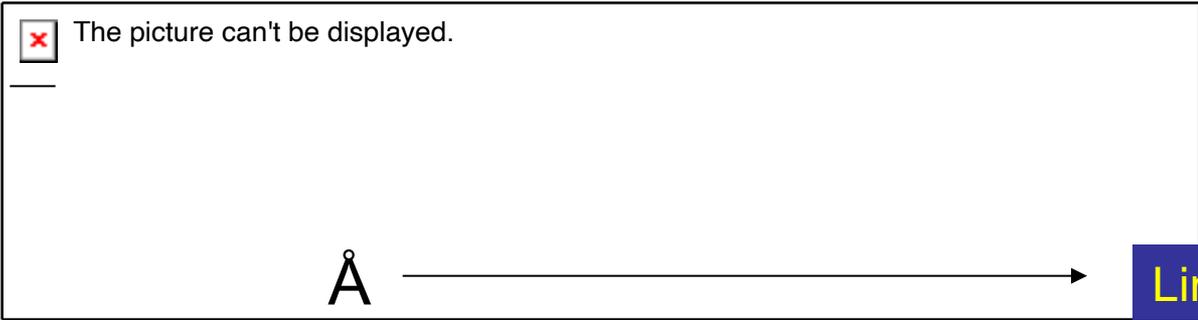
Gráfico da frequência da radiação emitida pelo átomo de hidrogênio contra $1/n^2$ ($n = 3, 4, 5, \dots$).



Balmer (1885)



Para valor de n muito altos,



Å

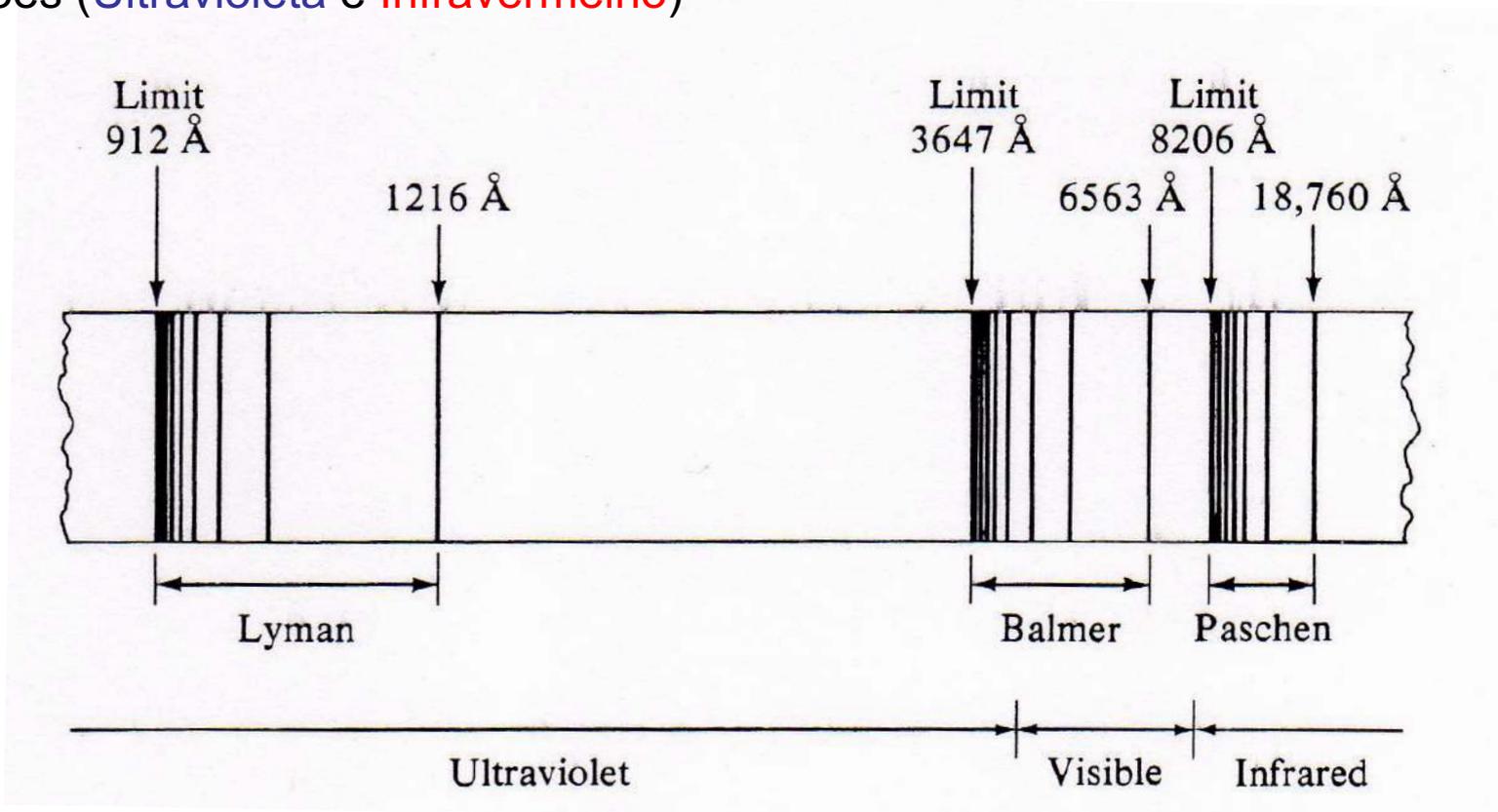


Limite da Série



Séries de Lyman (1906) e Paschen (1908)

- Entretanto, existem outras linhas no espectro do átomo de hidrogênio em outras regiões (Ultravioleta e Infravermelho)



- Outras séries descobertas: Séries de Bracket (1922), Pfund (1924) e Humphreys (>1924).

Johannes Rydberg (1888)



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

- Generalizou a fórmula de Balmer para levar em consideração todas as linhas observadas no espectro do hidrogênio pelos outros pesquisadores.

$$\bar{n} = \frac{1}{l} = 109680 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{cm}^{-1} \quad \text{Balmer}$$

$$\bar{n} = \frac{1}{l} = 109680 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \text{cm}^{-1} \quad (n_2 > n_1)$$

$$\bar{n} = \frac{1}{l} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \text{cm}^{-1}$$

R_H , constante
de Rydberg,
109.680 cm^{-1} .

Johannes Rydberg (1888)



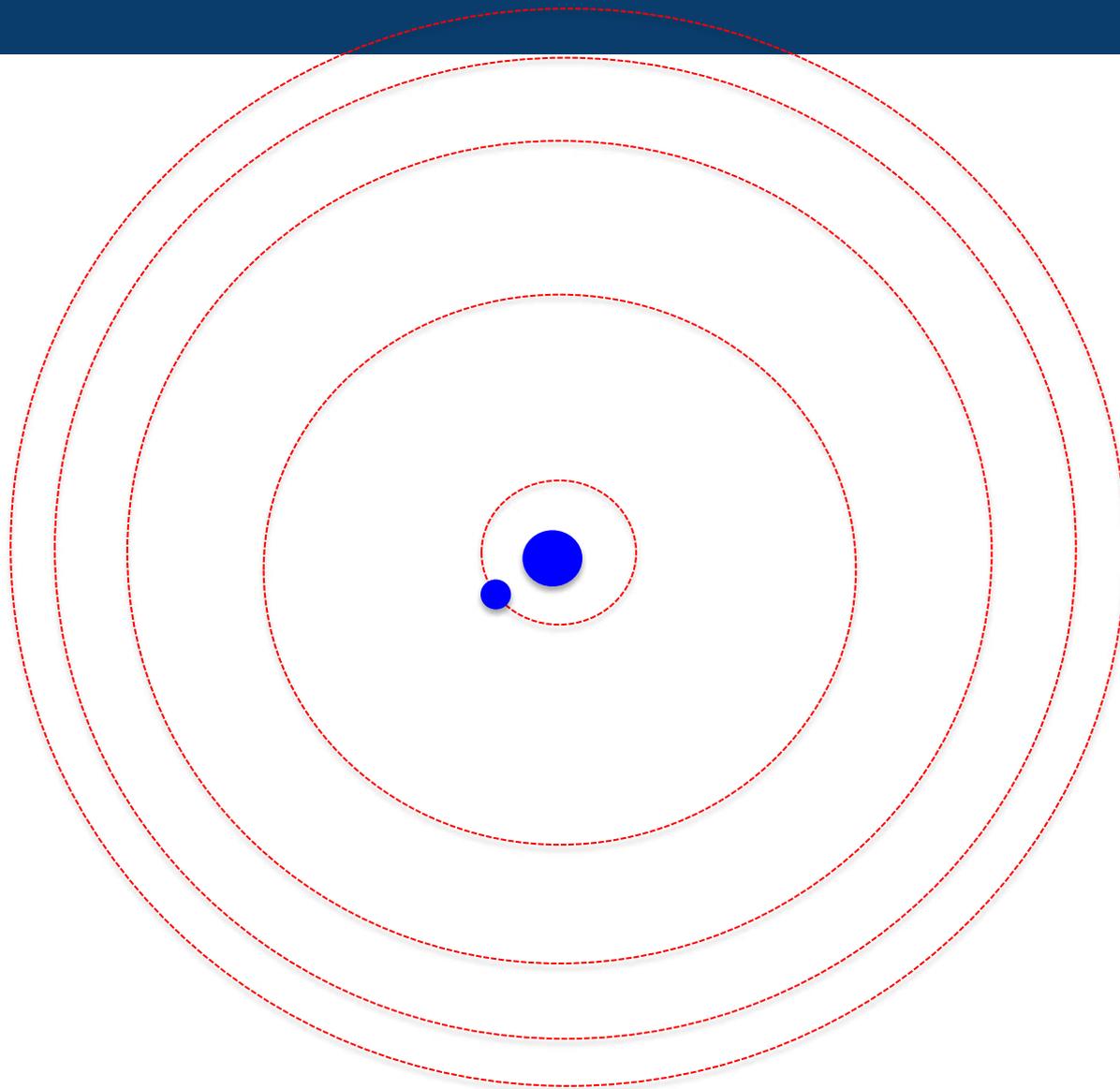
IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

$$n = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \text{cm}^{-1}$$

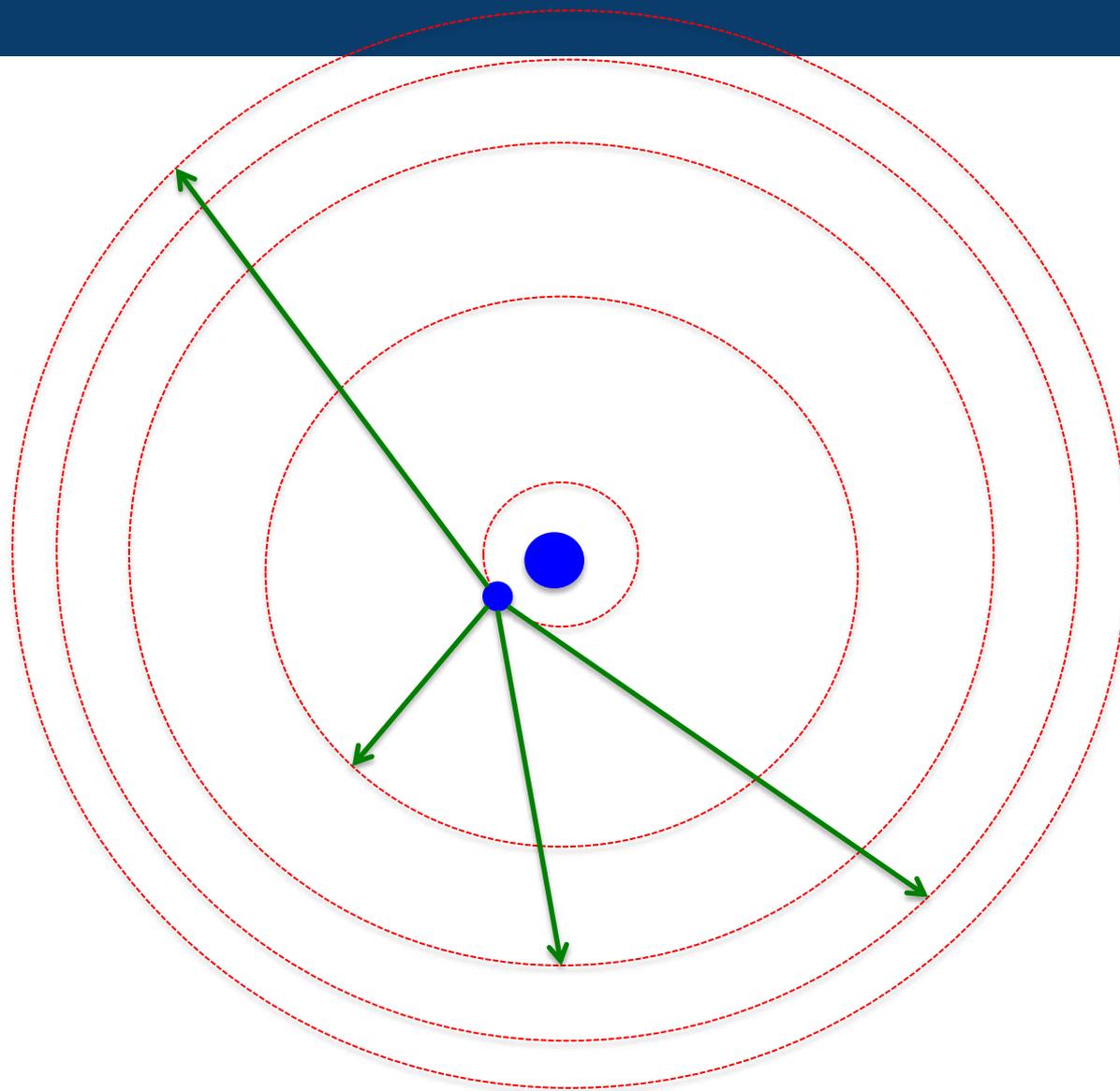
Nome	n_1	n_2	Região do espectro eletromagnético
Lyman	1	$n = 2, 3, 4, \dots$	Ultravioleta
Balmer	2	$n = 3, 4, 5, \dots$	Visível
Paschen	3	$n = 4, 5, 6, \dots$	Infravermelho
Bracket	4	$n = 5, 6, 7, \dots$	Infravermelho
Pfund	5	$n = 6, 7, 8, \dots$	Infravermelho
Humphreys	6	$n = 7, 8, 9, \dots$	Infravermelho

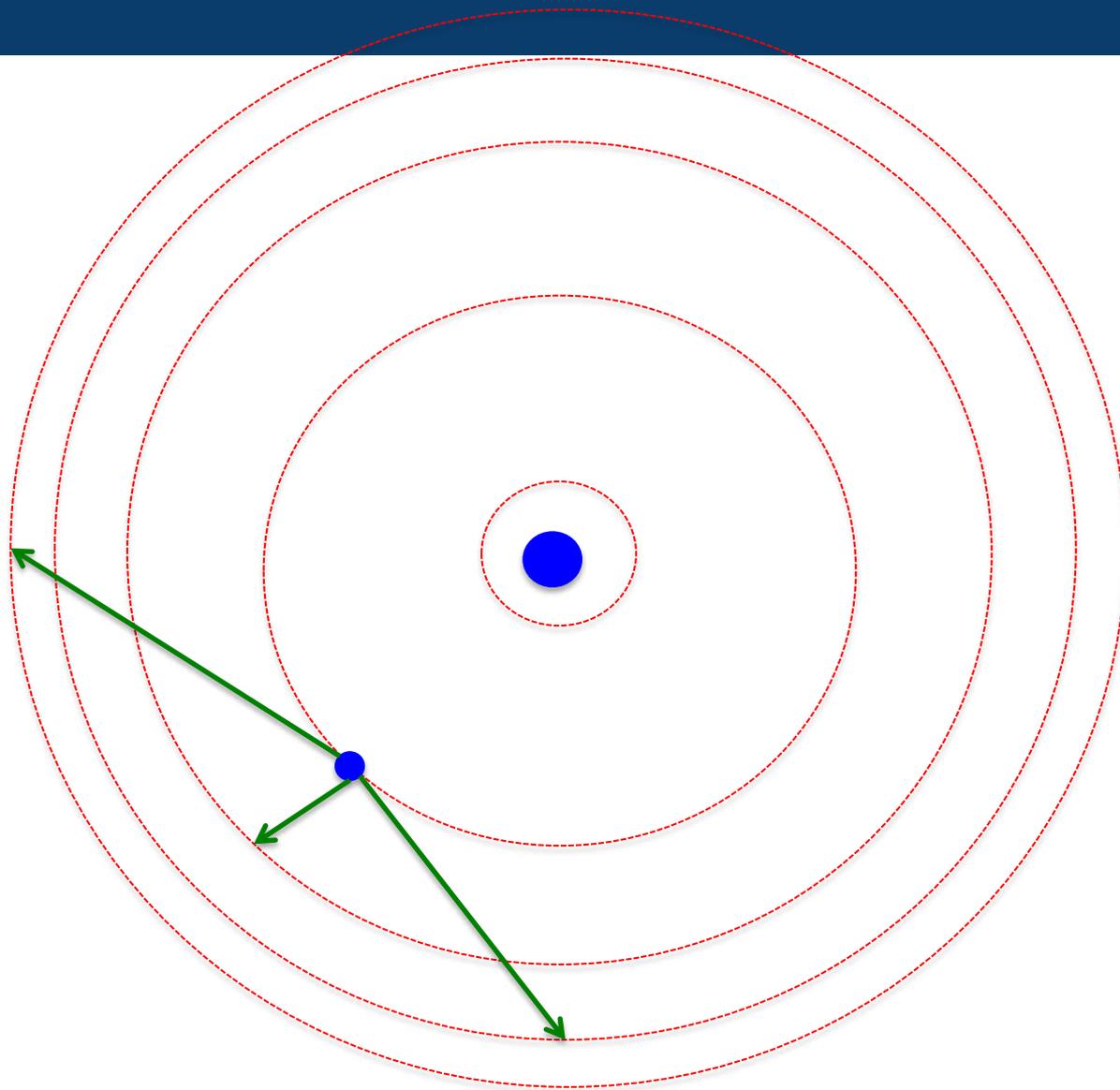


O que isto tudo quer dizer?



Elétron girando em torno do núcleo

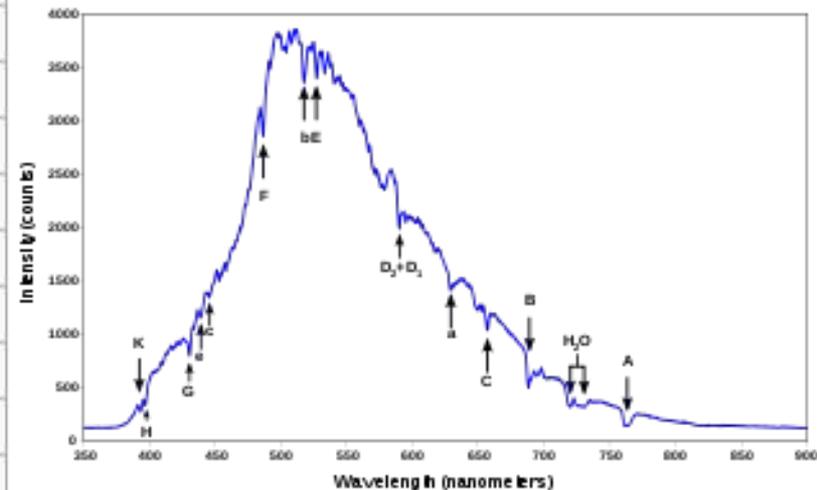




Linhas de Fraunhofer



Designation	Element	Wavelength (nm)	Designation	Element	Wavelength (nm)
y	O ₂	898.765	c	Fe	495.761
Z	O ₂	822.696	F	Hβ	486.134
A	O ₂	759.370	d	Fe	466.814
B	O ₂	686.719	e	Fe	438.355
C	H _α	656.281	G'	Hγ	434.047
a	O ₂	627.661	G	Fe	430.790
D ₁	Na	589.592	G	Ca	430.774
D ₂	Na	588.995	h	Hδ	410.175
D ₃ or d	He	587.5618	H	Ca ⁺	396.847
e	Hg	546.073	K	Ca ⁺	393.368
E ₂	Fe	527.039	L	Fe	382.044
b ₁	Mg	518.362	N	Fe	358.121
b ₂	Mg	517.270	P	Ti ⁺	336.112
b ₃	Fe	516.891	T	Fe	302.108
b ₄	Fe	516.891	t	Ni	299.444
b ₄	Mg	516.733			





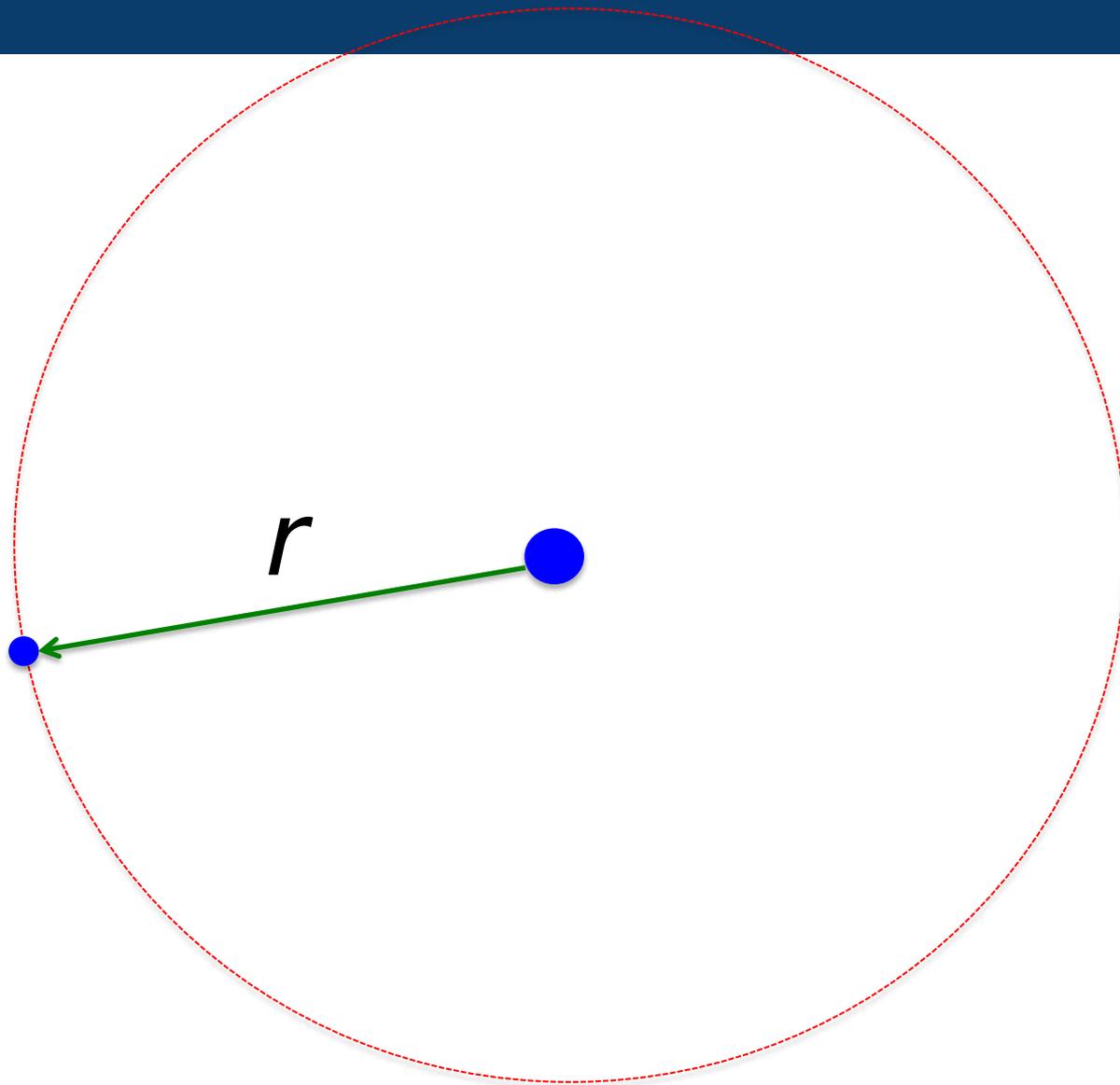
Por que podemos ter apenas órbitas específicas?



The image shows a screenshot of a quantum mechanics simulation software interface. The main window displays a Bohr-style model of an atom with a central nucleus and several concentric electron shells. The outermost shell is labeled $n=2$. A vertical column of colored spheres represents the electron shells, with a label "Line of Fraunhofer" next to it. To the left, a control panel titled "Atomic Model" includes buttons for "Atom", "Photo Emission", "Quantum Radio Waves", "Wave", "Spectrum", and "Microscope". The "Spectrum" panel at the bottom right shows a graph of intensity versus wavelength (nm) with several discrete spectral lines. The "Electron energy level" panel on the right shows a vertical axis for energy (eV) with levels labeled $n=1$, $n=2$, and $n=3$. The $n=2$ level is highlighted. The interface also includes a "Department" section at the top left and a "Light control" panel at the bottom center.



Antes de entendermos o que está
acontecendo... uma revisão



Movimento circular uniforme



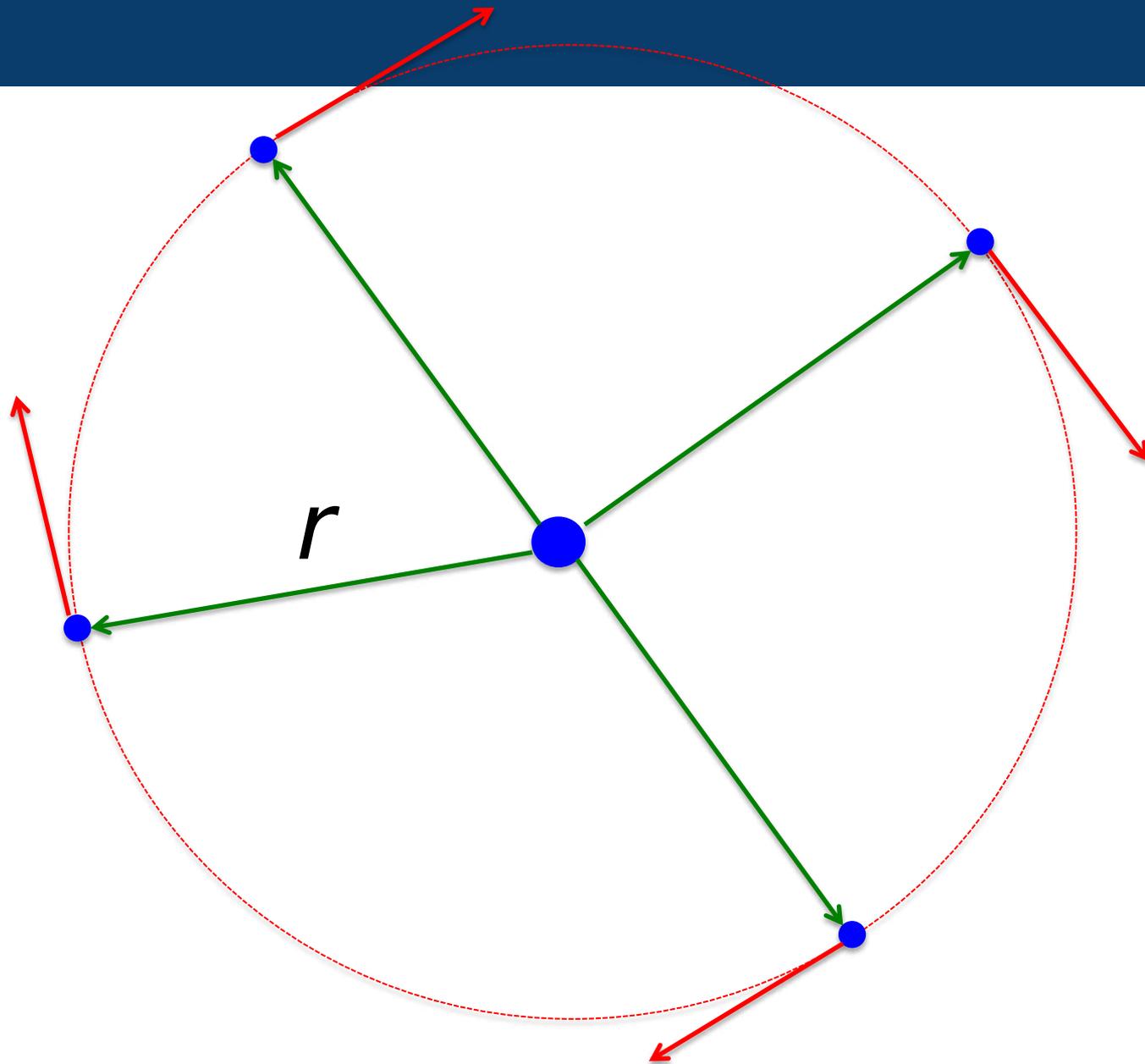
IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

Por que é uniforme?



1ª. Lei de Newton:

Um corpo em movimento retilíneo uniforme ou em repouso irá permanecer no mesmo estado (em movimento retilíneo uniforme ou em repouso) a não ser que haja sobre ele uma força externa.



Movimento circular uniforme

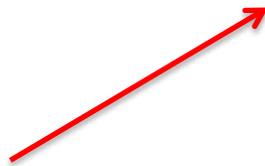


IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



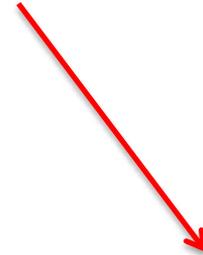
1

\neq



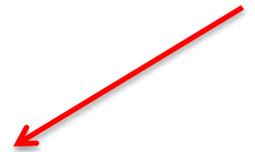
2

\neq



3

\neq

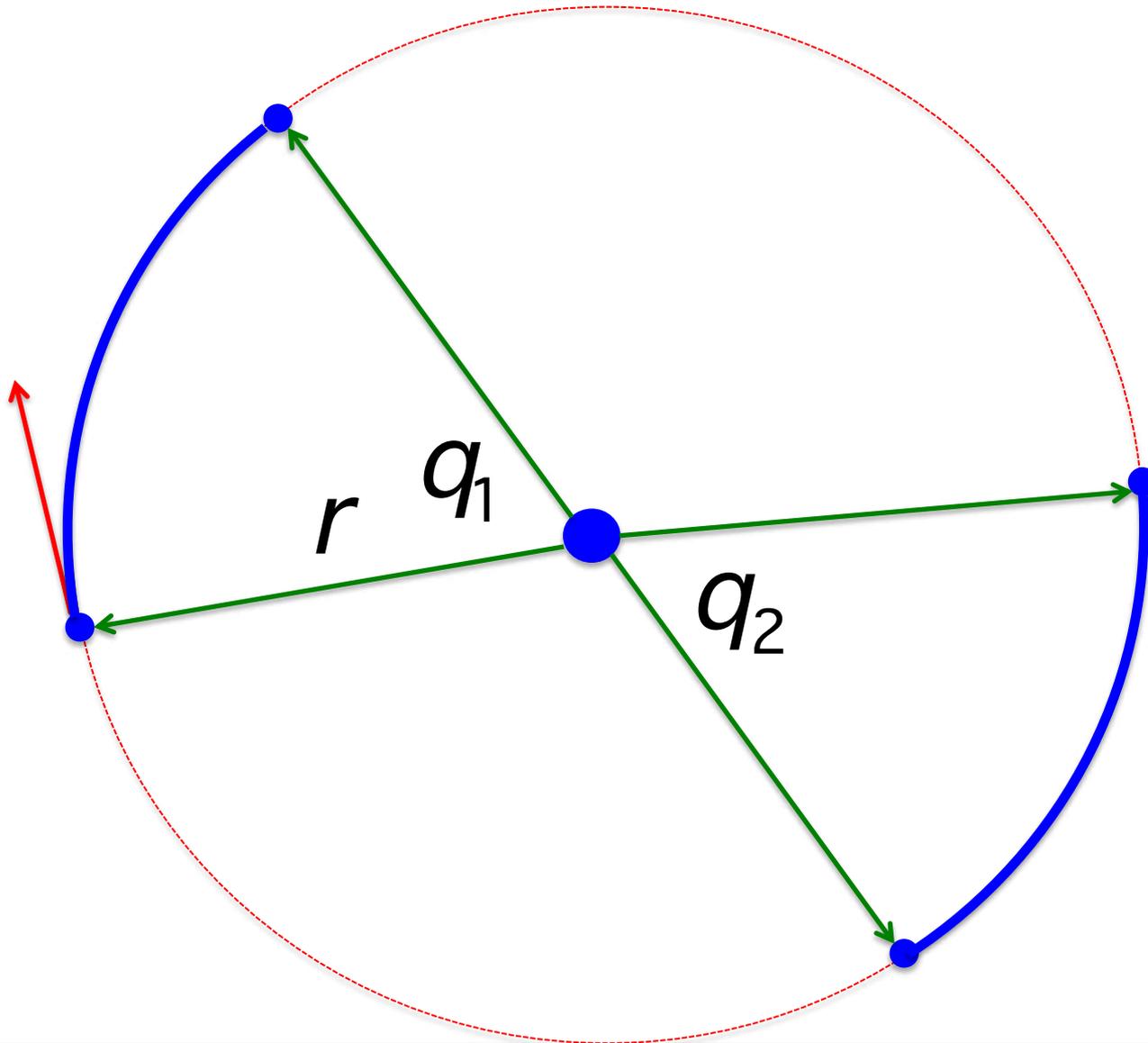


4

Ângulos iguais em tempos iguais



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



$$q_1 = q_2$$

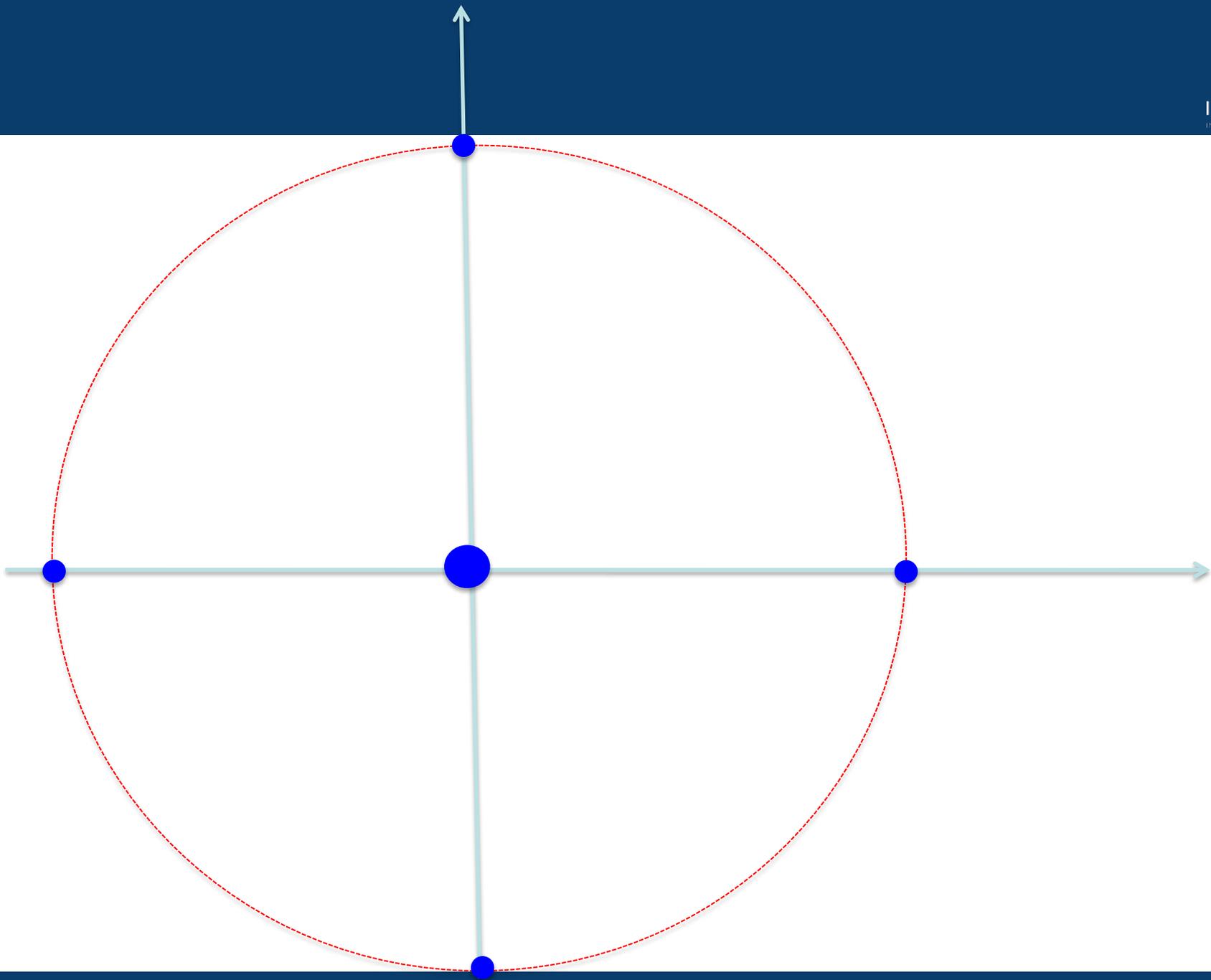
$$t_1 = t_2$$

Tempo para uma revolução completa



Período

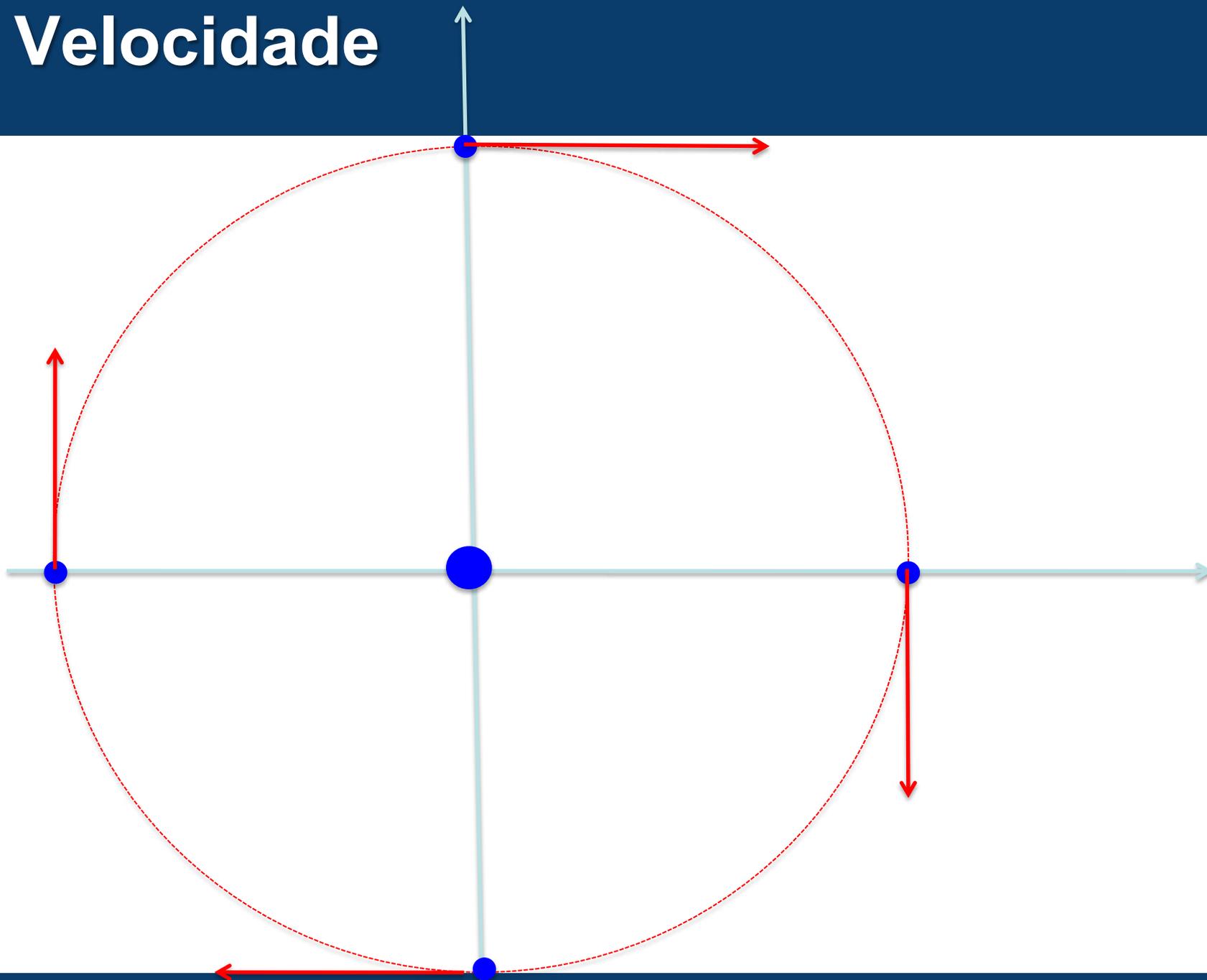
$$T = \frac{1}{f} = \frac{2\pi}{v}$$



Velocidade



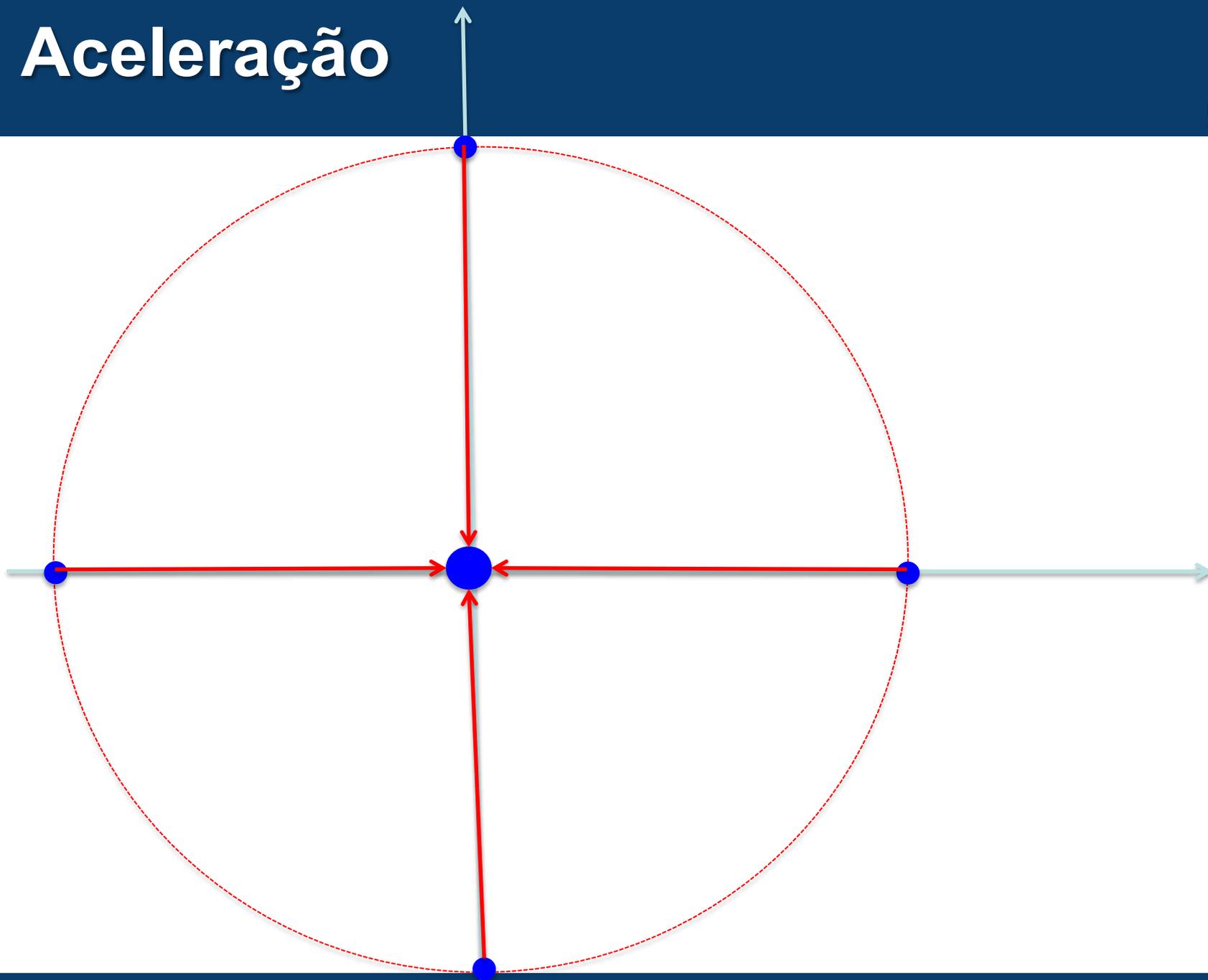
IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



Aceleração



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



A força



$$\vec{F} = -m \frac{v^2}{r} \hat{r}$$

Forças que apontam para o centro...

$$\vec{F}_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r^2} \hat{r}$$

Qual é a grandeza constante



$$L = mr^2\omega$$

O momento angular

Voltando ao átomo



Inconsistência com a teoria eletromagnética



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

- Elétrons em órbita circular deveriam irradiar continuamente ondas eletromagnéticas até cair no núcleo.
- Colapso atômico.
- A física clássica não conseguia explicar este fenômeno
- Era necessário uma nova teoria.
- **Modelo atômico de Bohr.**



Nem todo herói usa capa



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



Culver Pictures

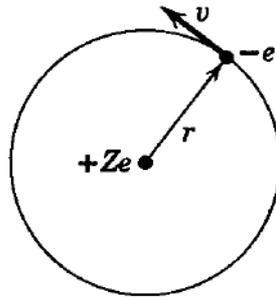
Niels Bohr (1885-1962)

O átomo de Bohr



IFT - UNESP
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

1-) Cenário: movimento do elétron em torno do núcleo.



e – carga elétrica elementar
 v - velocidade do elétron
 r – raio da órbita
 Z – número atômico
 ϵ_0 - permissividade elétrica no vácuo

2-) Temos a força que mantém o elétron 'ligado' ao núcleo que é a força eletrostática e força que mantém o movimento em uma órbita circular que é a força centrípeta. Para manter-se a condição de estabilidade orbital Força eletrostática = força centrípeta.

$$F_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} \quad F_c = m \frac{v^2}{r}$$
$$F_c = F_e$$



$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}$$

O átomo de Bohr



3-) O momento angular clássico

$$L = mrv$$

4-) Considerando o momento quantizado=momento angular clássico, pode-se determinar a velocidade do elétron na órbita, a qual dependerá do valor de n .

$$mrv = n\hbar \quad v = \frac{n\hbar}{mr}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

5-) Da equação de igualdade entre a força centrípeta e a força elétrica, temos que

$$Ze^2 = 4\pi\epsilon_0mv^2r = 4\pi\epsilon_0mr \left(\frac{n\hbar}{mr} \right)^2 = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2\hbar^2}{mr}$$

O átomo de Bohr

- Pode-se então obter o raio da órbita do elétron em torno do núcleo

$$r = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2 \hbar^2}{mZe^2}$$

- Fazendo o cálculo para a primeira órbita eletrônica do átomo de hidrogênio (estado fundamental), $Z=1$ e $n=1$

$$\epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12} C^2 / N.m$$

$$\hbar = 1,054 \times 10^{-34} J.s$$

$$m = 9,11 \times 10^{-31} kg$$

$$e = 1,60 \times 10^{-19} C$$

$$r = 5,29 \times 10^{-11} m \approx 0,53A$$

raio de Bohr

O átomo de Bohr



- A energia total é dada pela soma da energia cinética + energia potencial (eletrostática)

$$E = K + V$$

- A energia cinética é dada por:

$$K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 2r}$$

- A energia potencial eletrostática é dada por:

$$V = - \int_r^{\infty} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} dr = - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

O átomo de Bohr: a energia

- A energia total é dada por:

$$E = K + V = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 2r} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 2r} = -K$$

- Usando $r = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2 \hbar^2}{mZe^2}$

- Temos finalmente que

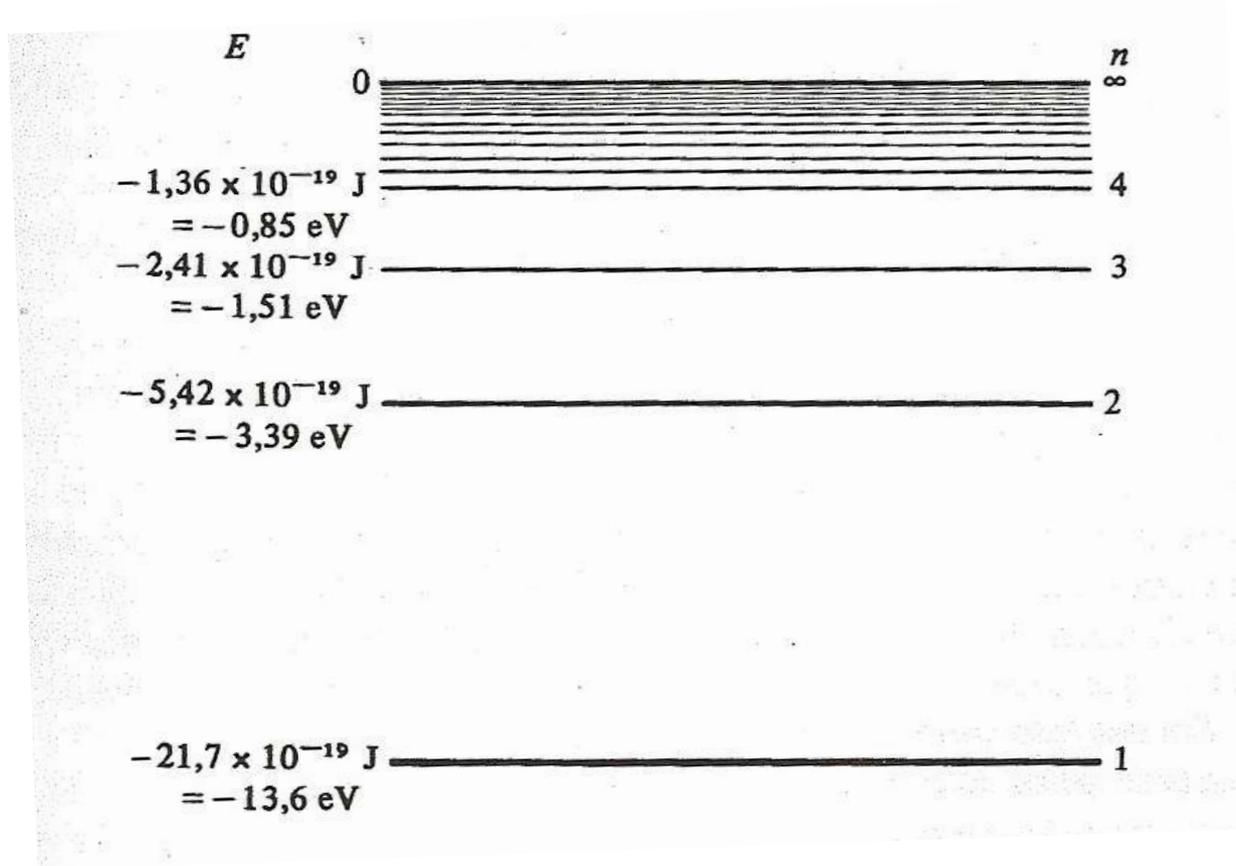
$$E = -\frac{mZ^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

A quantização no momento angular orbital do elétron implica na quantização de sua energia total

O átomo de Bohr



- Pode-se a partir a equação para os níveis de energia um diagrama e energias para o átomo de hidrogênio



O átomo de Bohr: transições

- Voltando a equação de energia para o átomo de hidrogênio

$$E = -\frac{mZ^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- Temos pelo quarto postulado de Bohr

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{mZ^2e^4}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

Frequência de emissão do fóton quando o elétron transita de um estado de maior para outro de menor energia

O átomo de Bohr

1-) As previsões essenciais do modelo de Bohr estão contidas nas equações de energia e do número de onda.

$$E = -\frac{mZ^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^22\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad \bar{\nu} = R_\infty Z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

2-) O estado normal de um átomo é quando o elétron tem menor energia ou $n=1$ (estado fundamental).

3-) Em uma descarga elétrica, ou algum outro processo, o átomo recebe energia devido a colisões, etc. O elétron deve sofrer uma transição para um estado de maior energia, ou estado excitado $n>1$.

4-) Obedecendo a lei natural dos sistemas físicos, o átomo tenderá a voltar ao seu estado de menor energia (estado fundamental).

5-) Em um grande número de processos de excitação e desexcitação, todas as possíveis transições ocorrem sendo emitido o espectro completo.

- Para o hidrogênio $Z=1$.

$$\bar{\nu} = R_{\infty} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

- Supondo $n_f = 2$ e $n_i > n_f$.

$$\bar{\nu} = R_{\infty} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, 5, 6, \dots$$

- Comparando com a série de Balmer

$$\bar{\nu} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, 5, 6, \dots$$

**As duas fórmulas são
idênticas se $R_H = R_{\infty}$**

A constante de Rydberg

- Pelas Fórmulas espectrais: Lyman, Paschen, Balmer, etc.

$$R_H = 1,09680 \times 10^7 m^{-1}$$

- Pelo modelo de Bohr

$$R_\infty \approx 1,09680 \times 10^7 m^{-1}$$

- O modelo de Bohr concorda com a série de Balmer, e com todas as outras séries espectroscópicas para o átomo de hidrogênio (o que será mostrado na sequência)

Considerações sobre o modelo de Bohr

- Sucesso na descrição das linhas espectroscópicas do átomo de hidrogênio.
- Raio da órbita do hidrogênio $0,53 \text{ \AA}$, concorda com o valor previsto para o diâmetro da molécula de hidrogênio $2,2 \text{ \AA}$.
- Falhas da teoria de Bohr: não conseguia explicar a intensidades relativas das linhas espectrais, não conseguia explicar as linhas espectrais de átomos mais complexos.
- Aqui ainda utilizou-se algumas considerações clássicas, como a lei de Coulomb (eletrostática) e as leis de Newton que foram usadas para valores discretos do momento angular.
- Dificuldades começaram a ser superadas na década de 20 do século passado com de Broglie, Schroedinger, Heisenberg, Pauli, Dirac e vários outros cientistas.