

# Um passeio pelos conceitos de Mecânica Quântica

Alexandre Reily Rocha

[alexandre.reily@unesp.br](mailto:alexandre.reily@unesp.br)

[@iftunesp](#)

[@alexandrereily](#)

# Retomando a aula passada

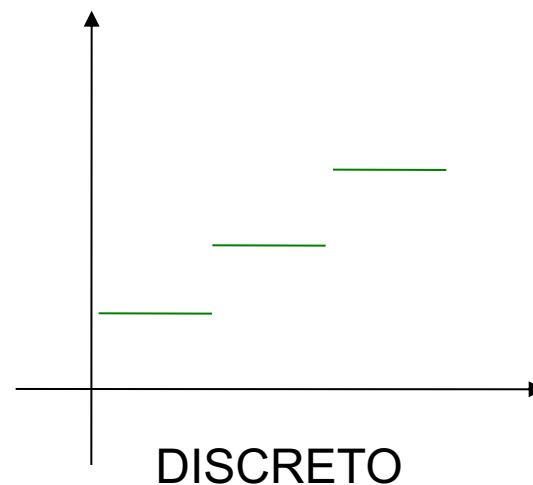
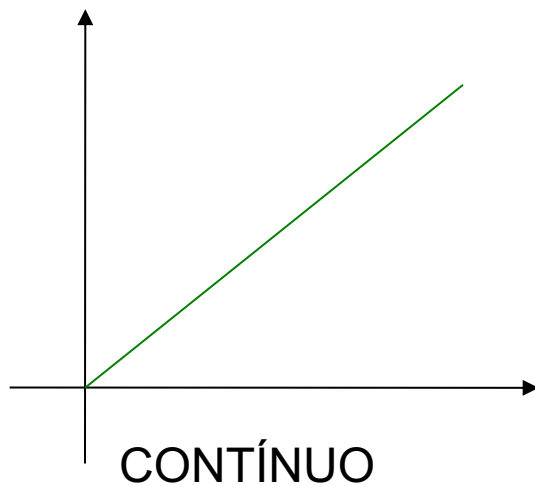


# Teoria de Planck



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!

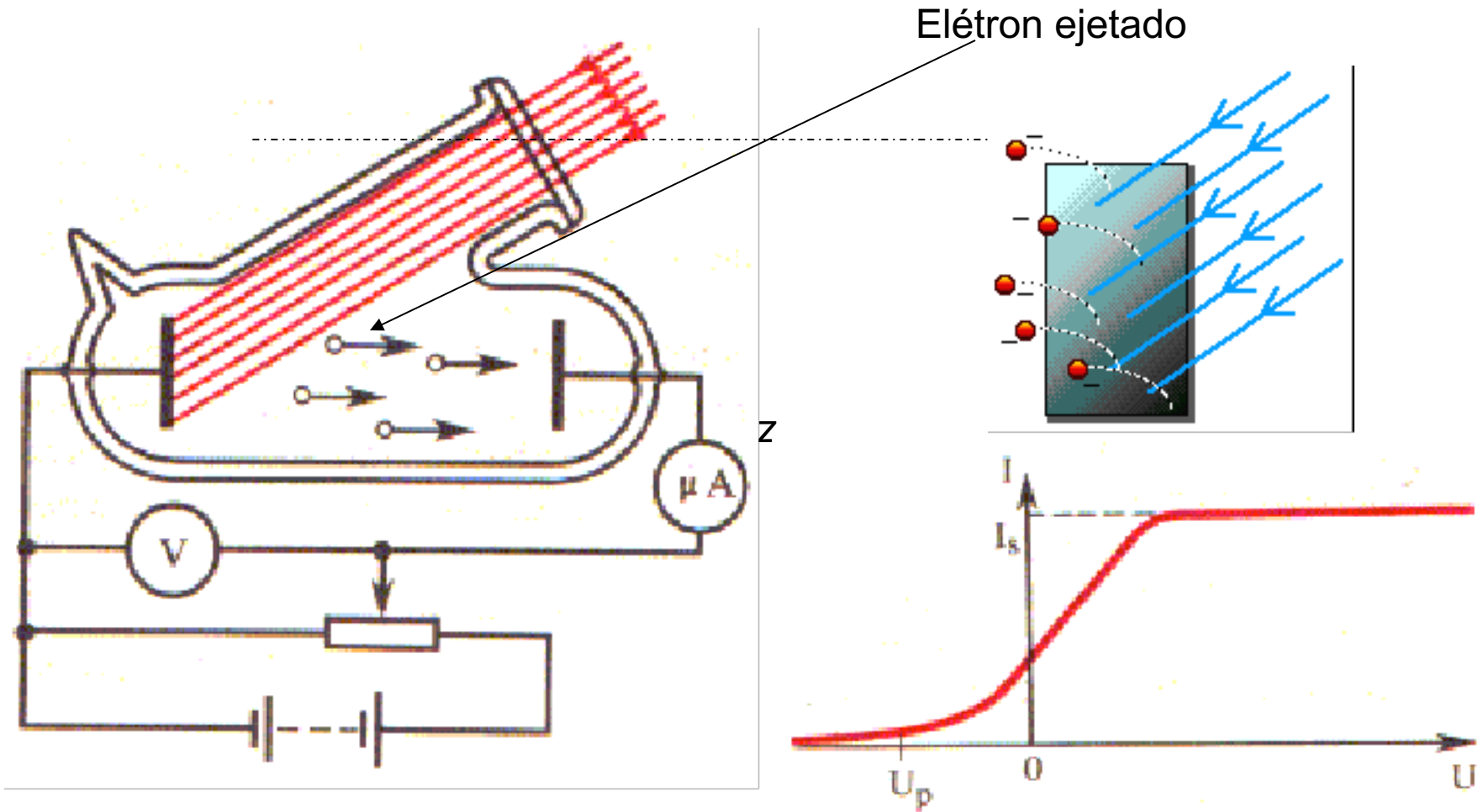
$$E = hf$$

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

# 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.



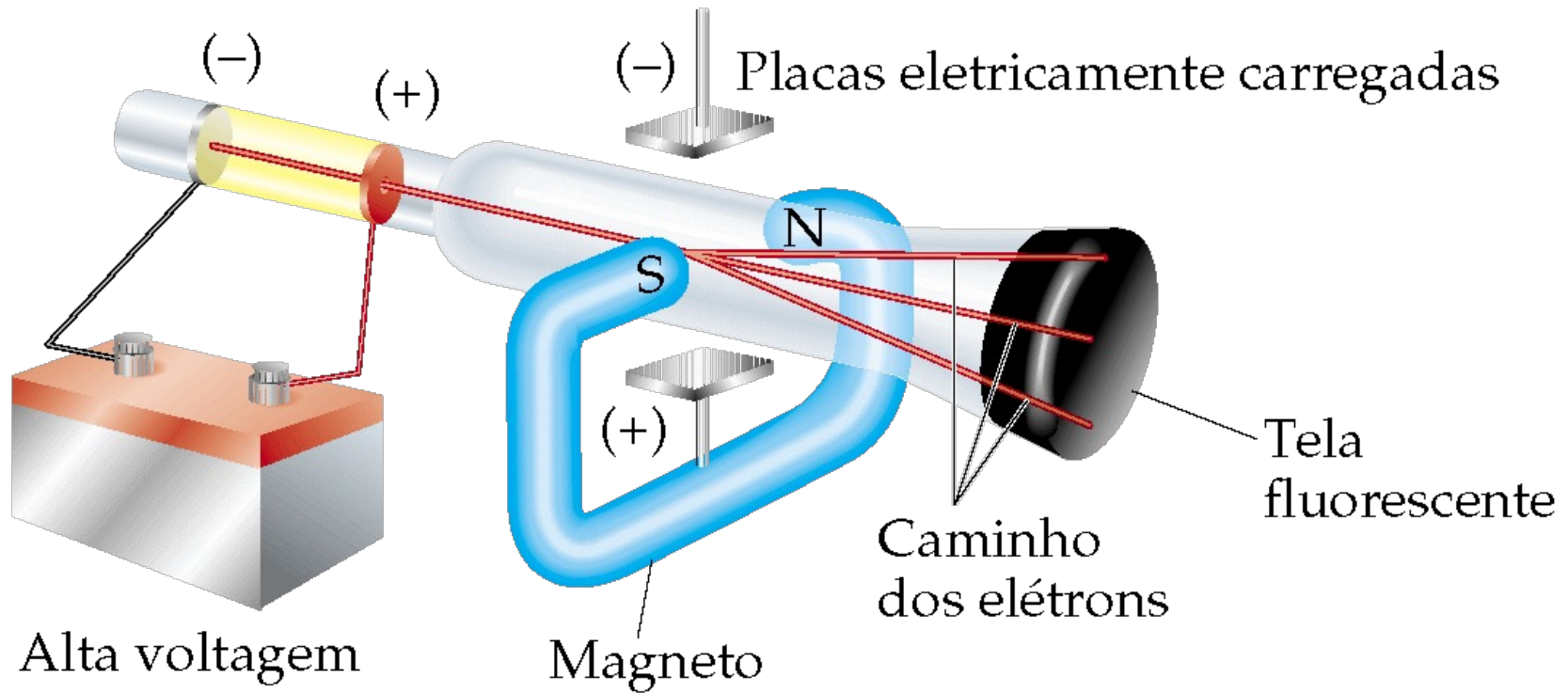
# Um átomo sem carga?

# A descoberta da estrutura atômica



IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

## Raios catódicos e elétrons



# Os modelos para o átomo



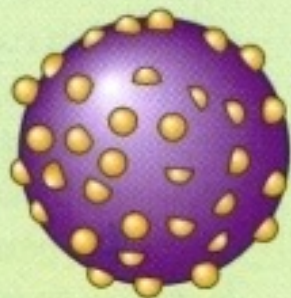
IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

**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



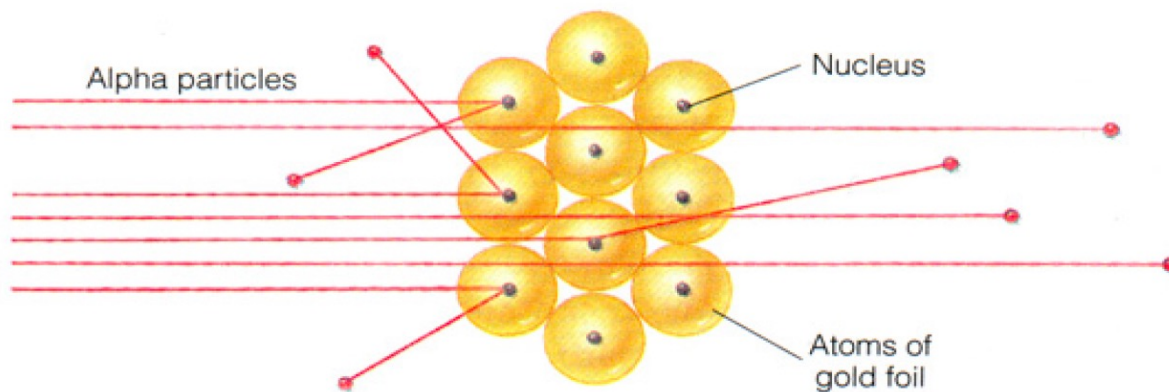
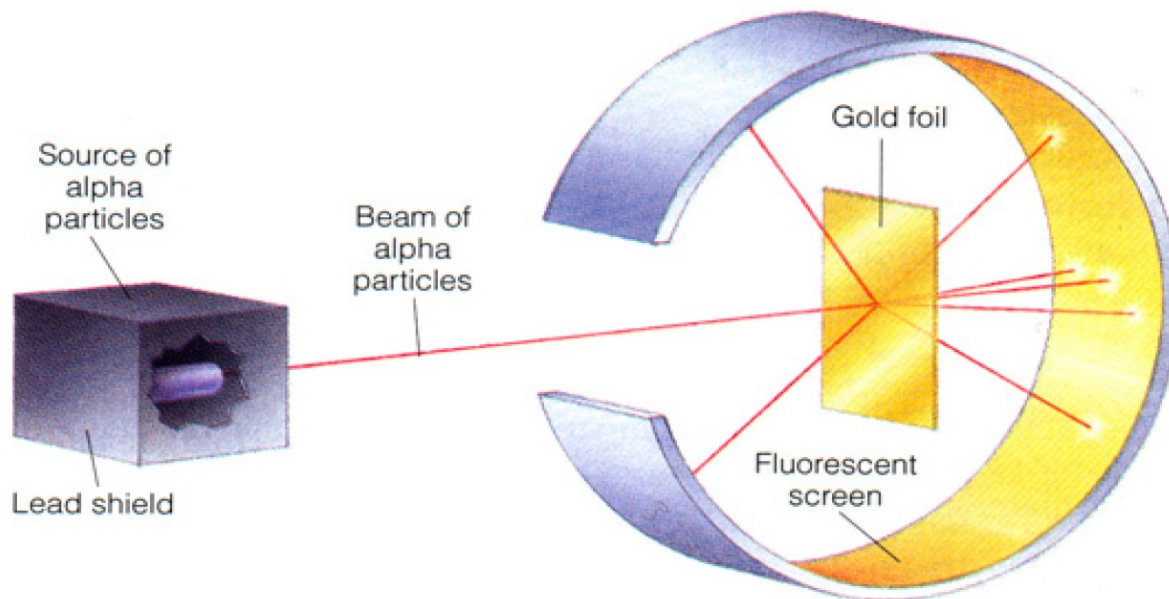
J. Dalton (1766-1844)

1897



J. J. Thomson (1856-1940)

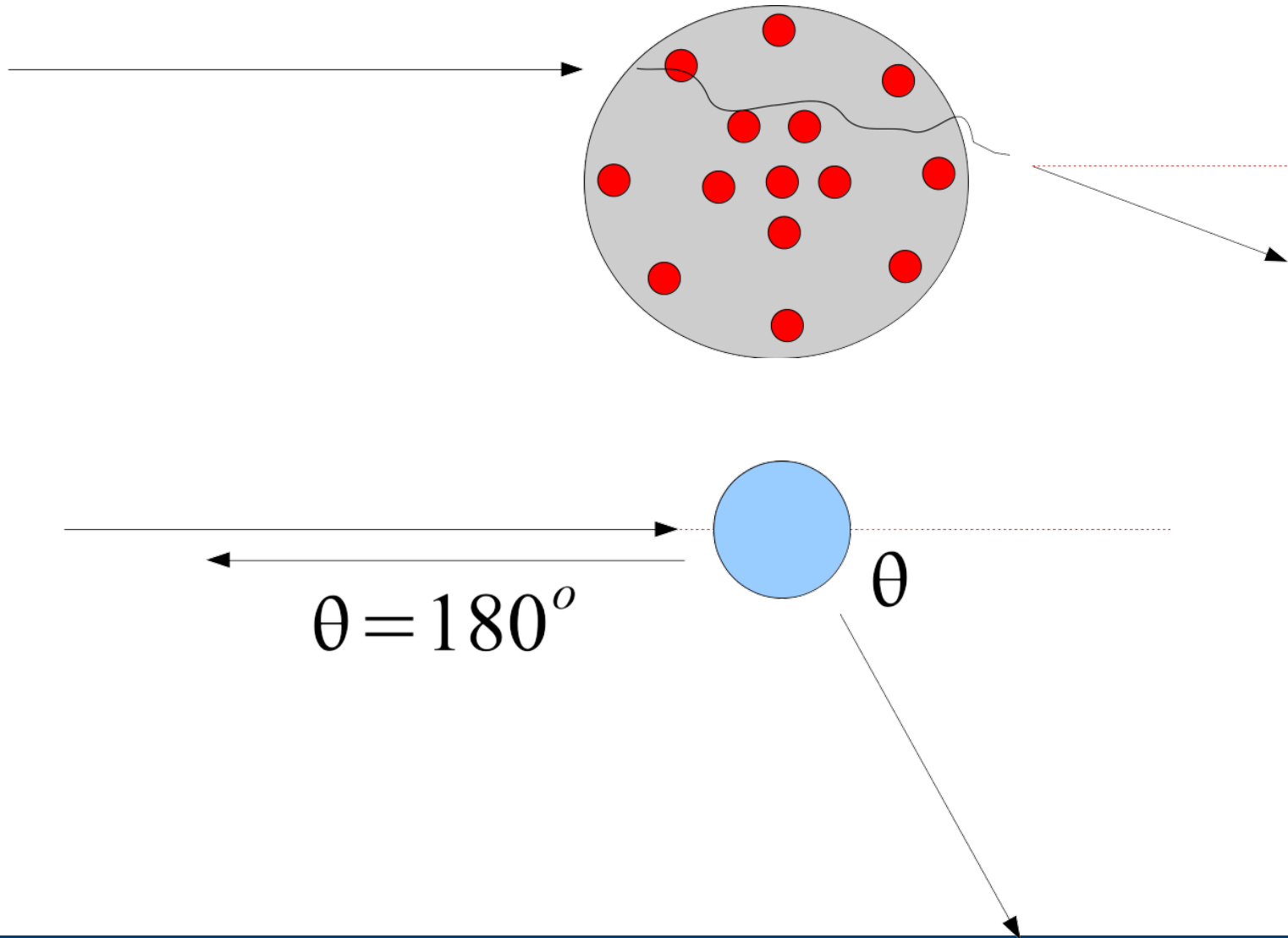
# Mais um experimento



# Expectativa vs. realidade



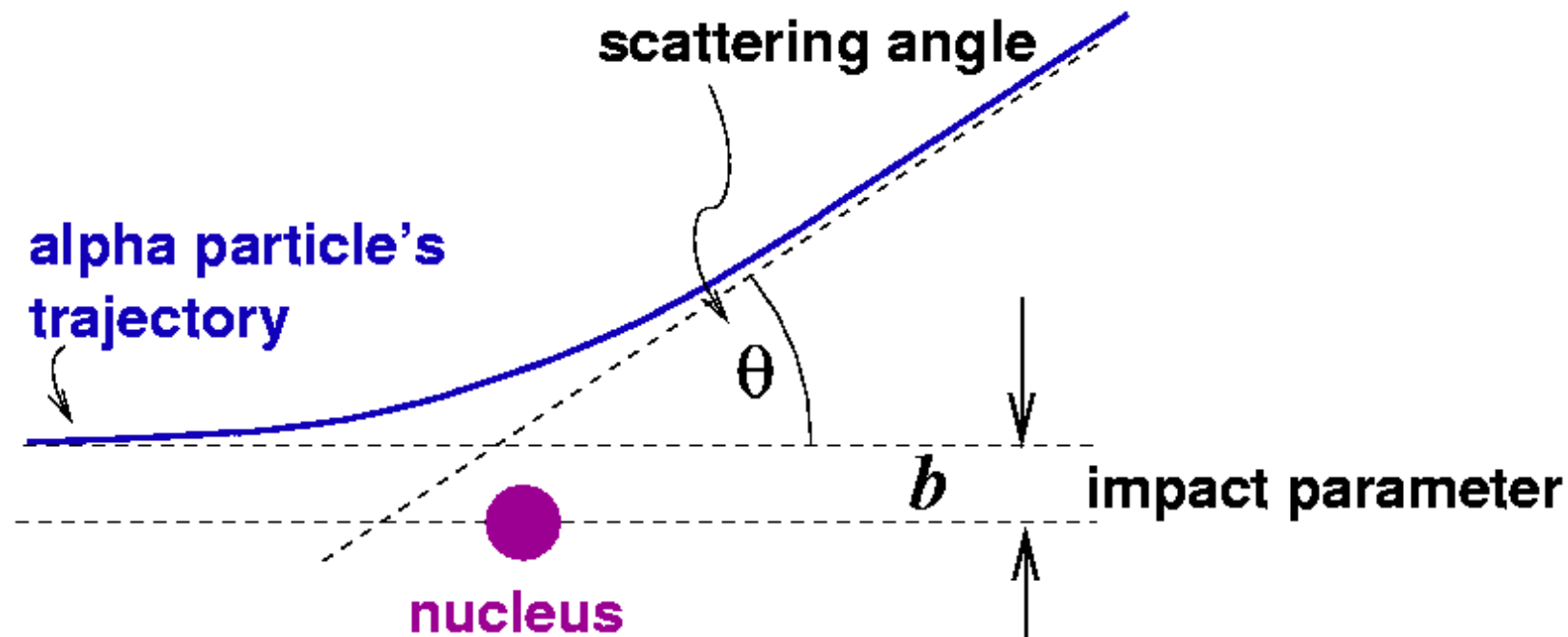
IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



# A explicação



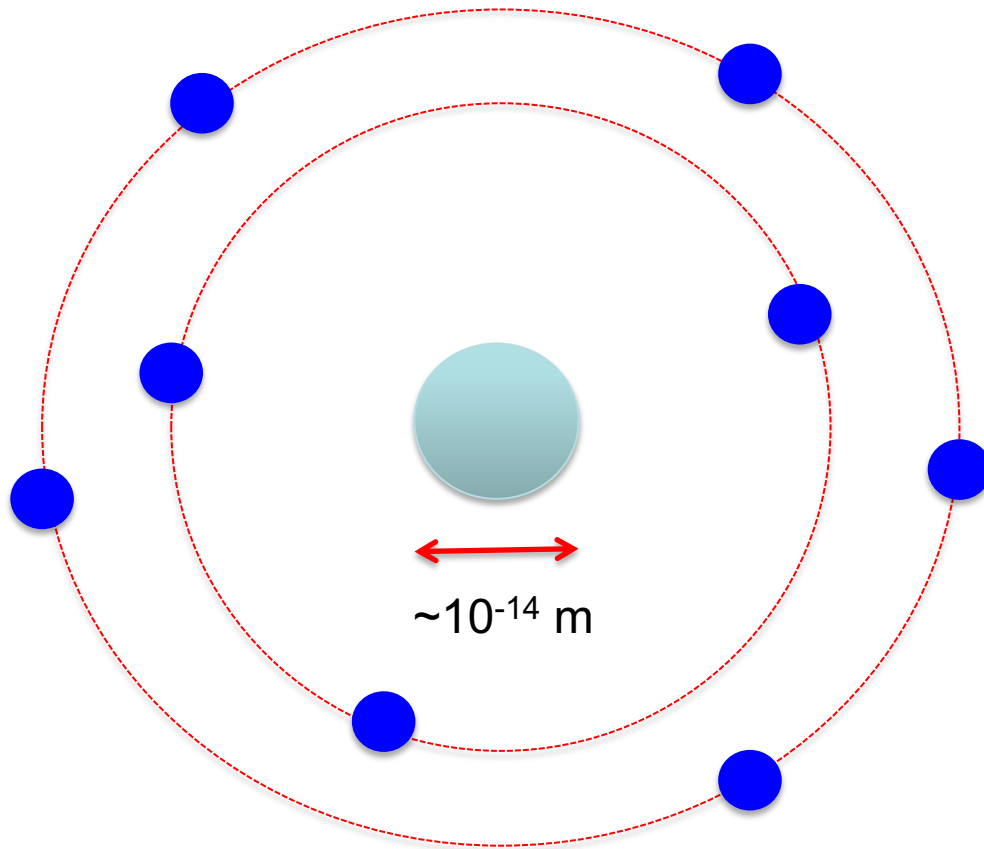
IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



# 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"



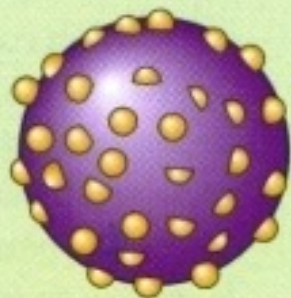
O átomo é uma esfera maciça, indivisível, neutra.

1803



J. Dalton (1766-1844)

**Thomson:**  
"Pudim de passas"



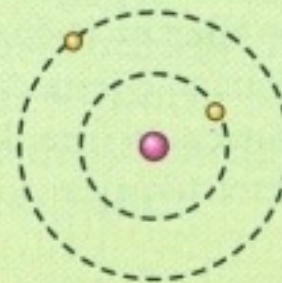
O átomo é uma esfera maciça, positiva com elétrons encravados nela.

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

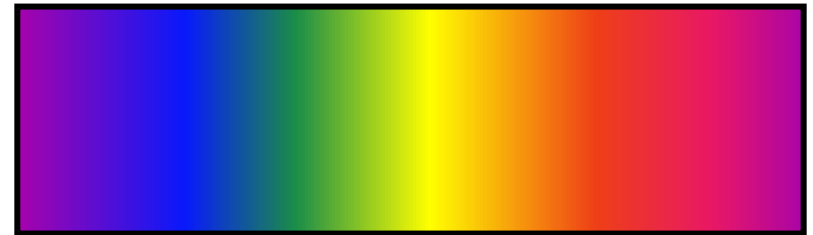
## **Voltemos à luz!**

# 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.



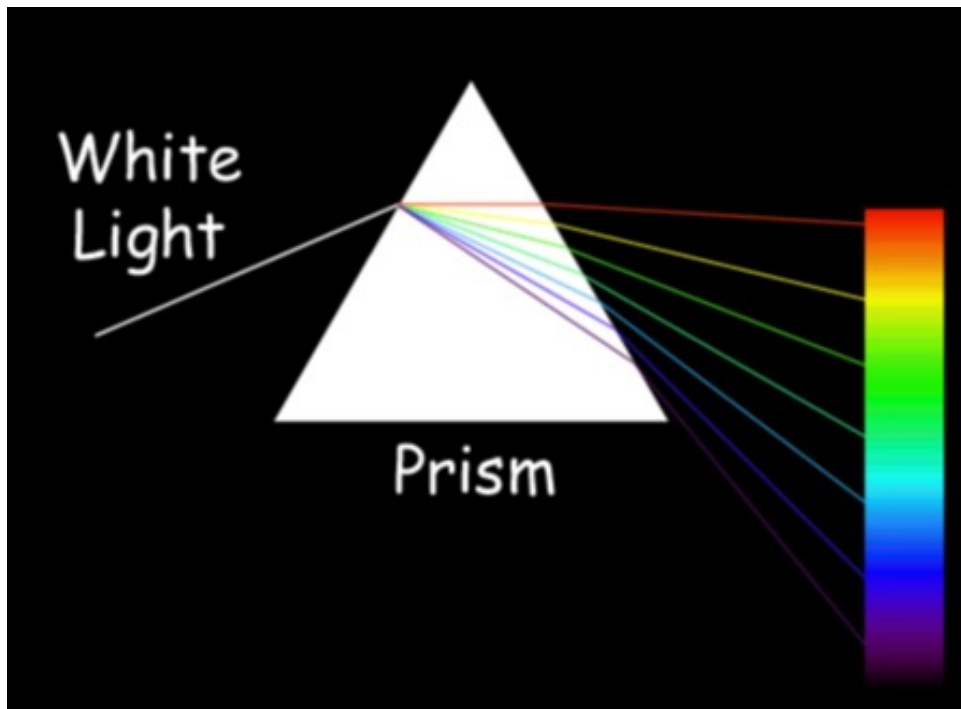
Tela


# A natureza da luz



IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

Porque a luz se separava no prisma?

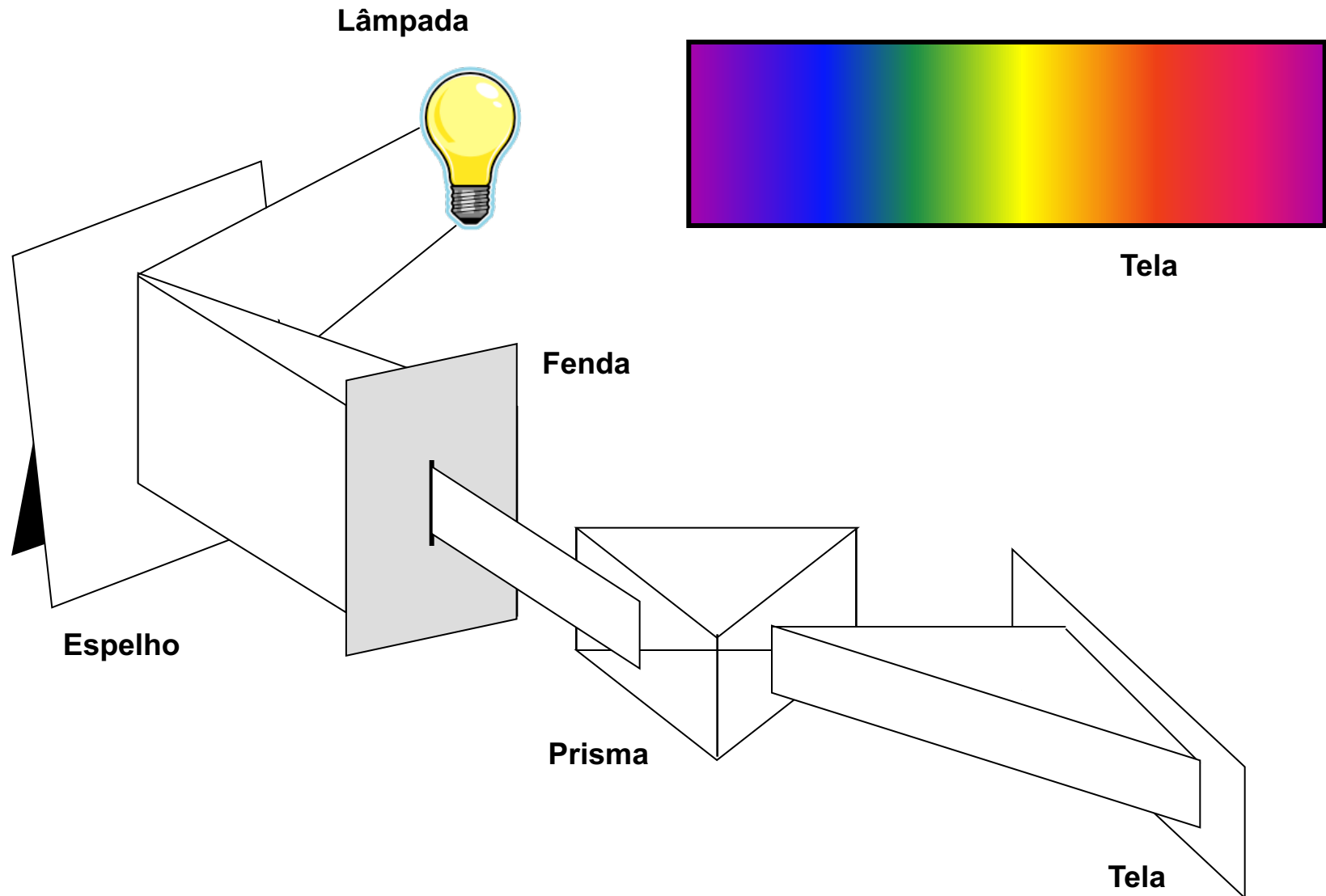


 The picture can't be displayed.

# A natureza da luz



IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

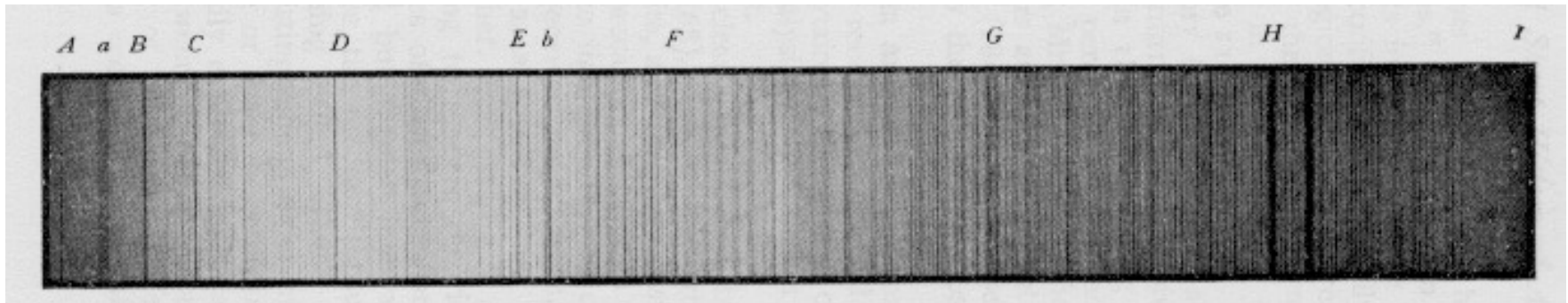


# Nem todas as cores aparecem



IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

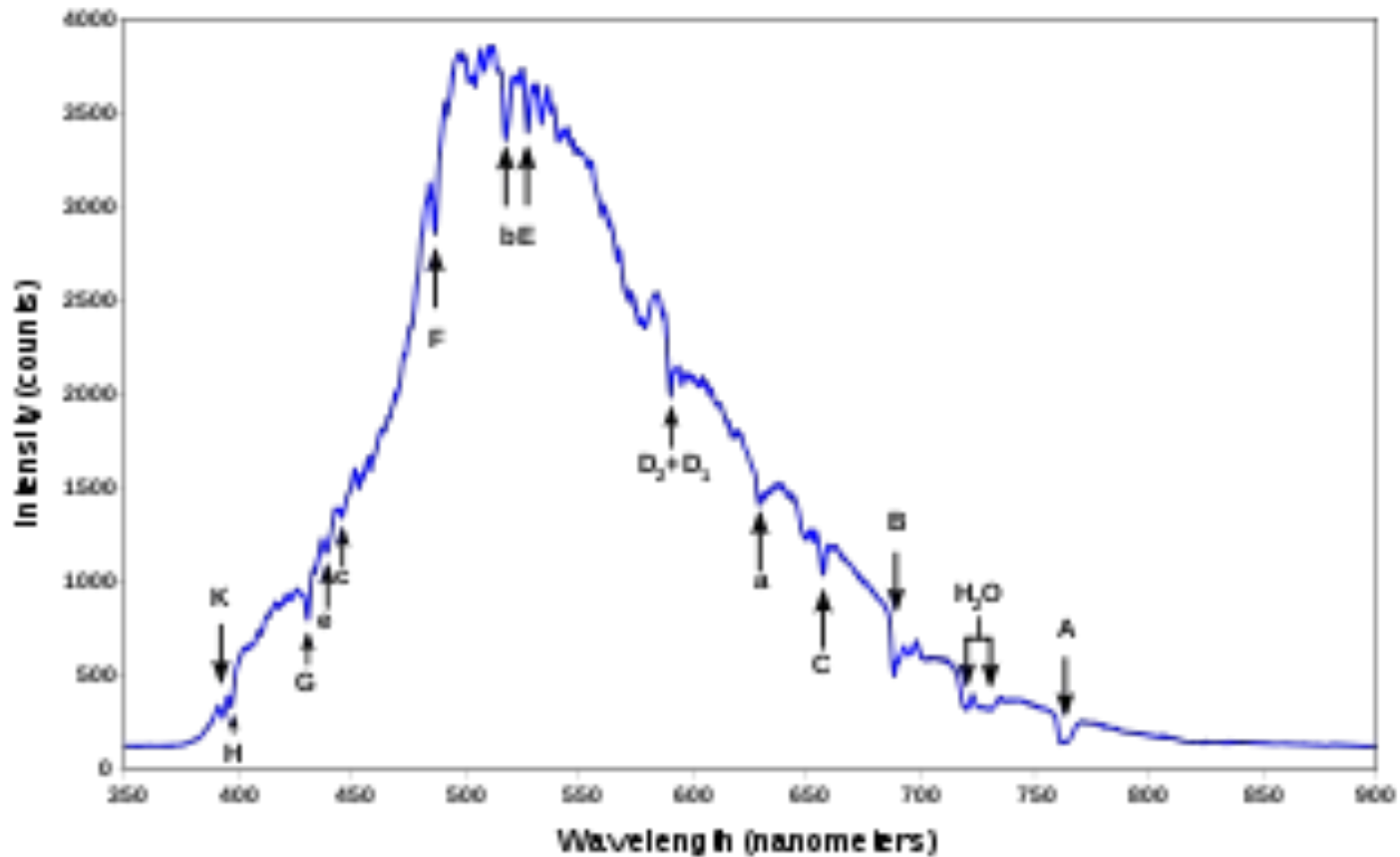
- William Hyde Wollaston (1766-1828): Em 1802, observou que passando a luz por uma fenda, e depois por um prisma, apareciam algumas linhas escuras no espectro, que ele interpretou como o limite das cores.
- Joseph von Fraunhofer (1787-1826): Até 1826, esse fabricante de instrumentos de vidro, já havia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

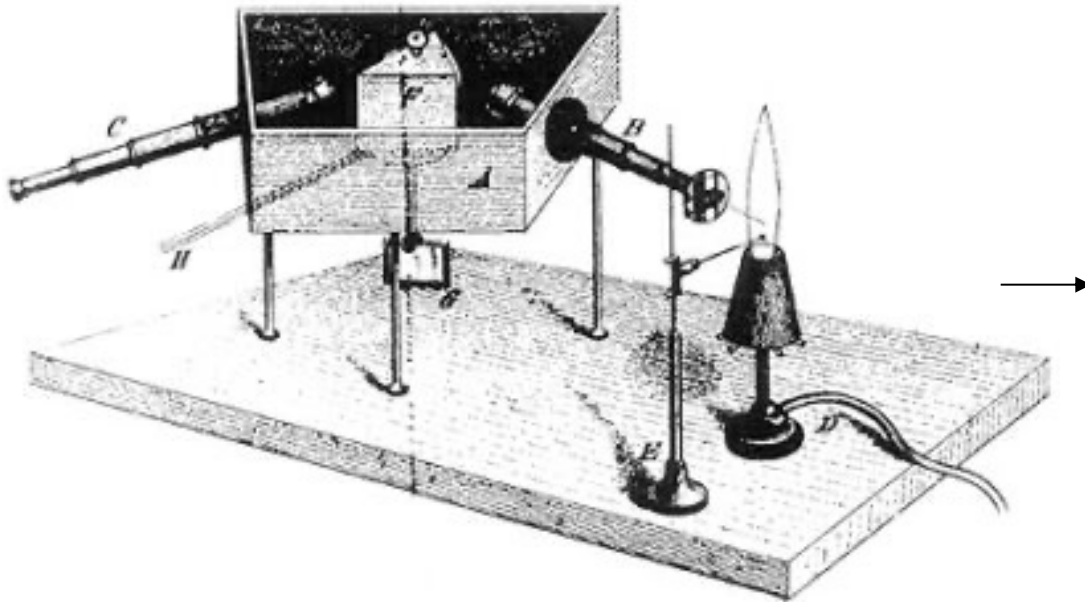


IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

- 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

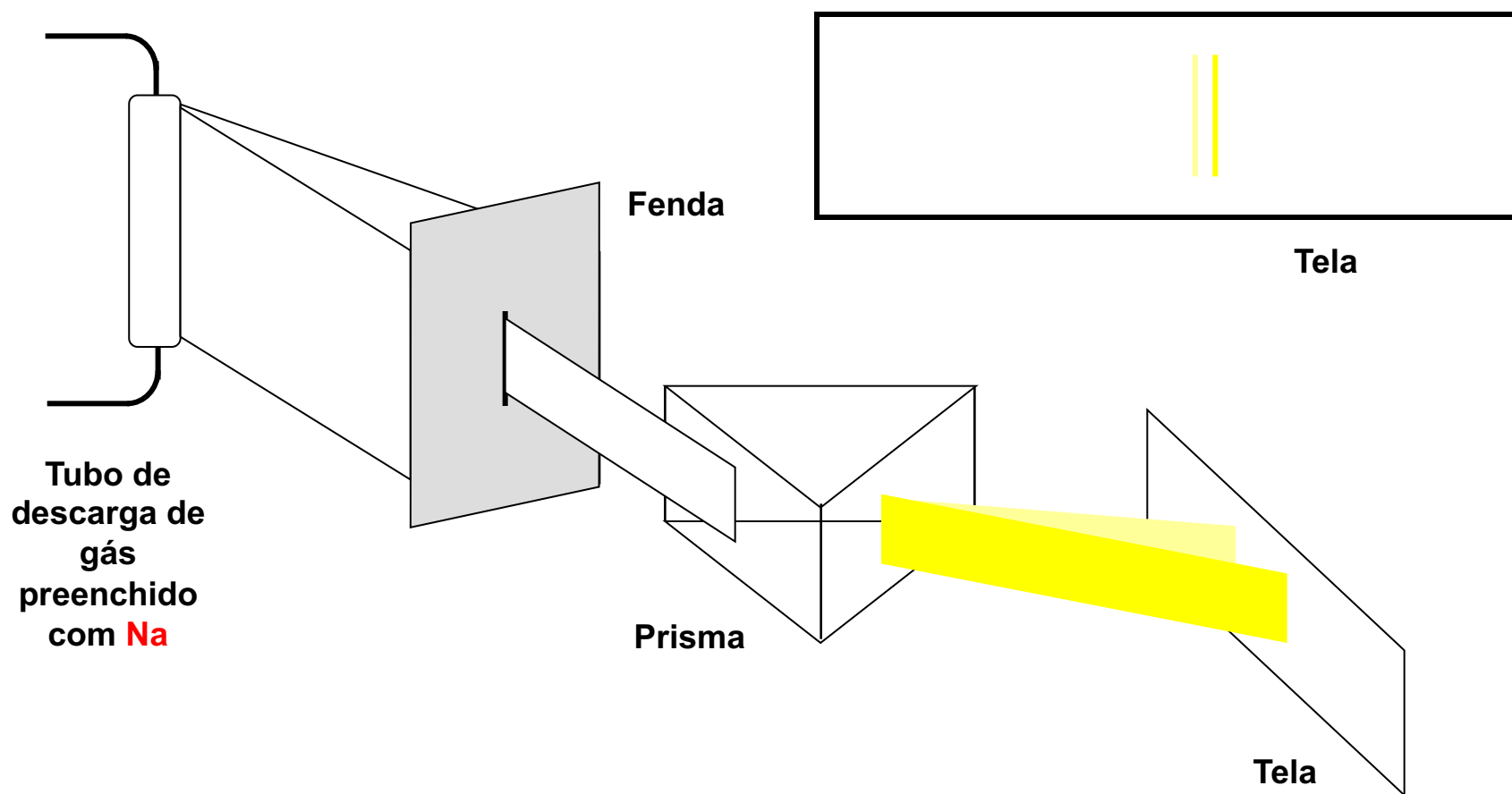


# Emissão atômica



IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

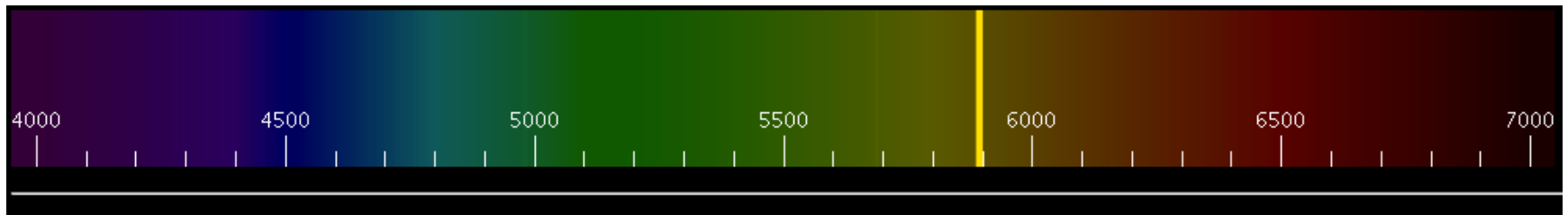
- Cada átomo, quando submetido à altas temperaturas ou a uma descarga elétrica, emite radiação eletromagnética em frequências características ou cada átomo apresenta um espectro característico



# Espectro do Sódio



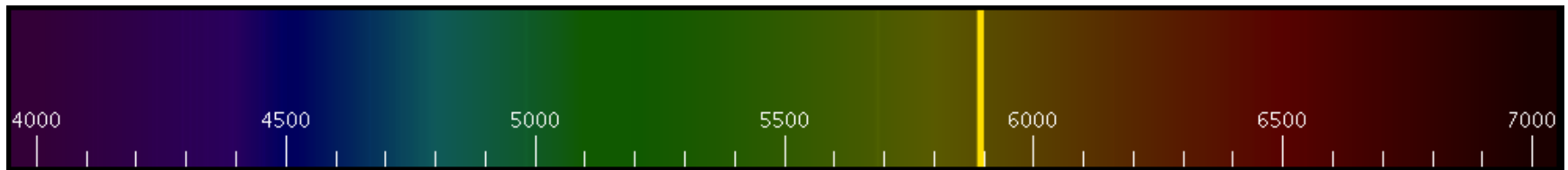
IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



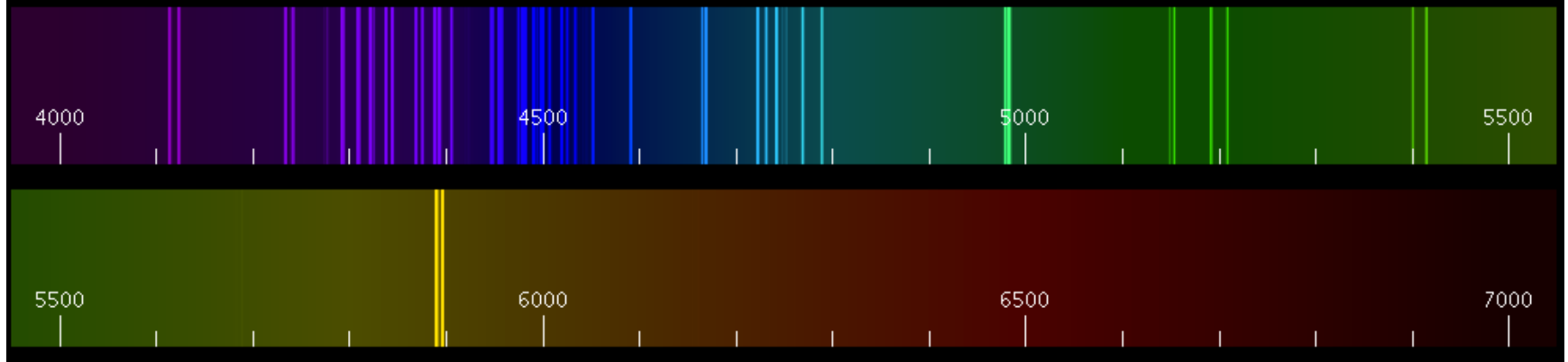
# Espectro do Sódio



IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



**The spectrum in two parts:**



# Leis de Kirchhoff



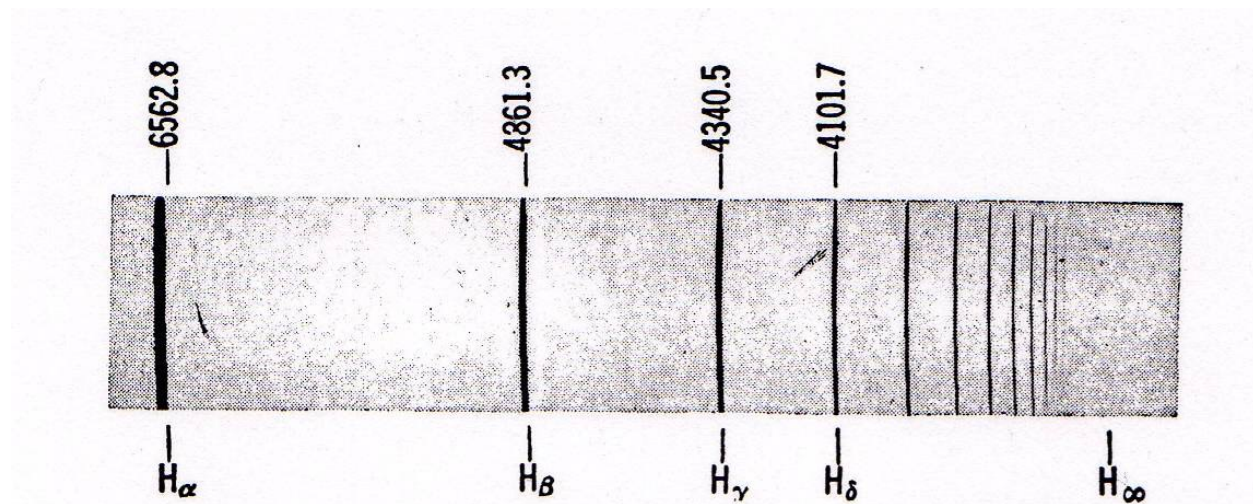
- 1) Um corpo opaco quente, sólido, líquido ou gasoso, emite um espectro contínuo.
- 2) Um gás transparente produz um espectro de linhas de emissão. O número e a posição das linhas depende dos elementos químicos presentes no gás.
- 3) Se um espectro contínuo passar por um gás à temperatura mais baixa, 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  $1/n^2$ .

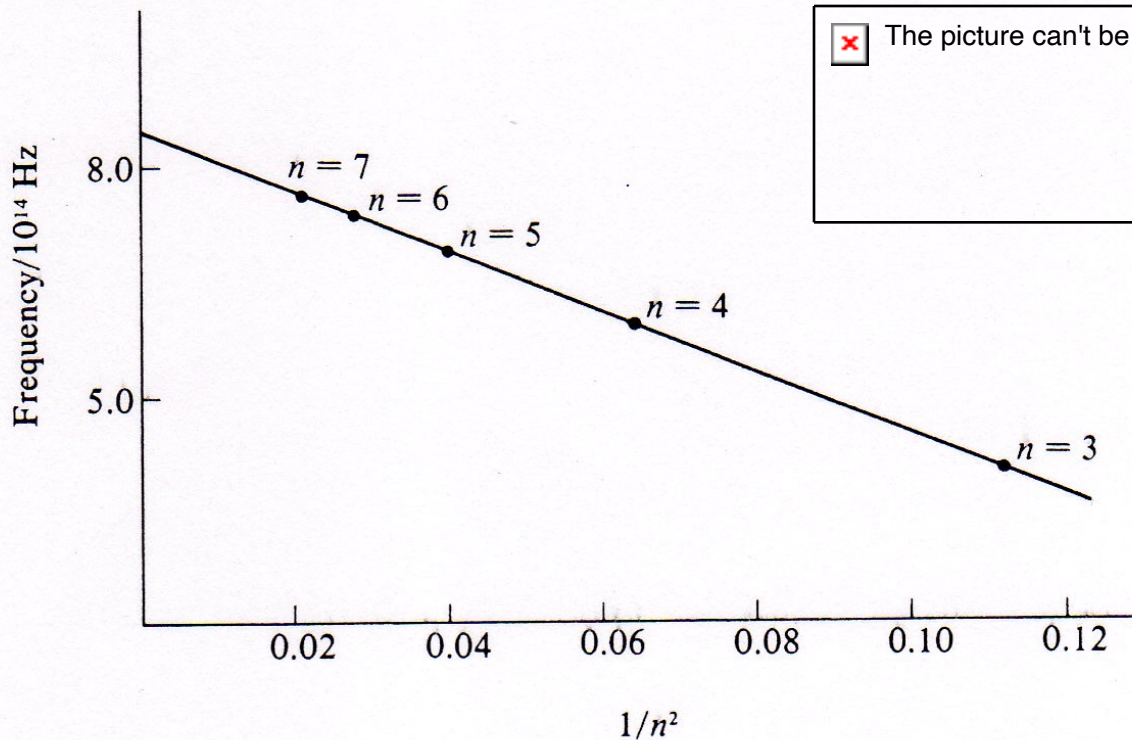


Gráfico da frequência da radiação emitida pelo átomo de hidrogênio contra  $1/n^2$  ( $n = 3, 4, 5, \dots$ ).




# Balmer (1885)


 The picture can't be displayed.

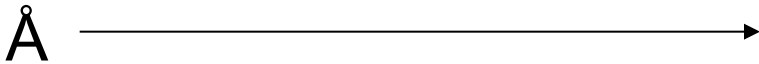
 The picture can't be displayed.

(Número de onda)

 The picture can't be displayed.

Para valor de  $n$  muito altos,

 The picture can't be displayed.

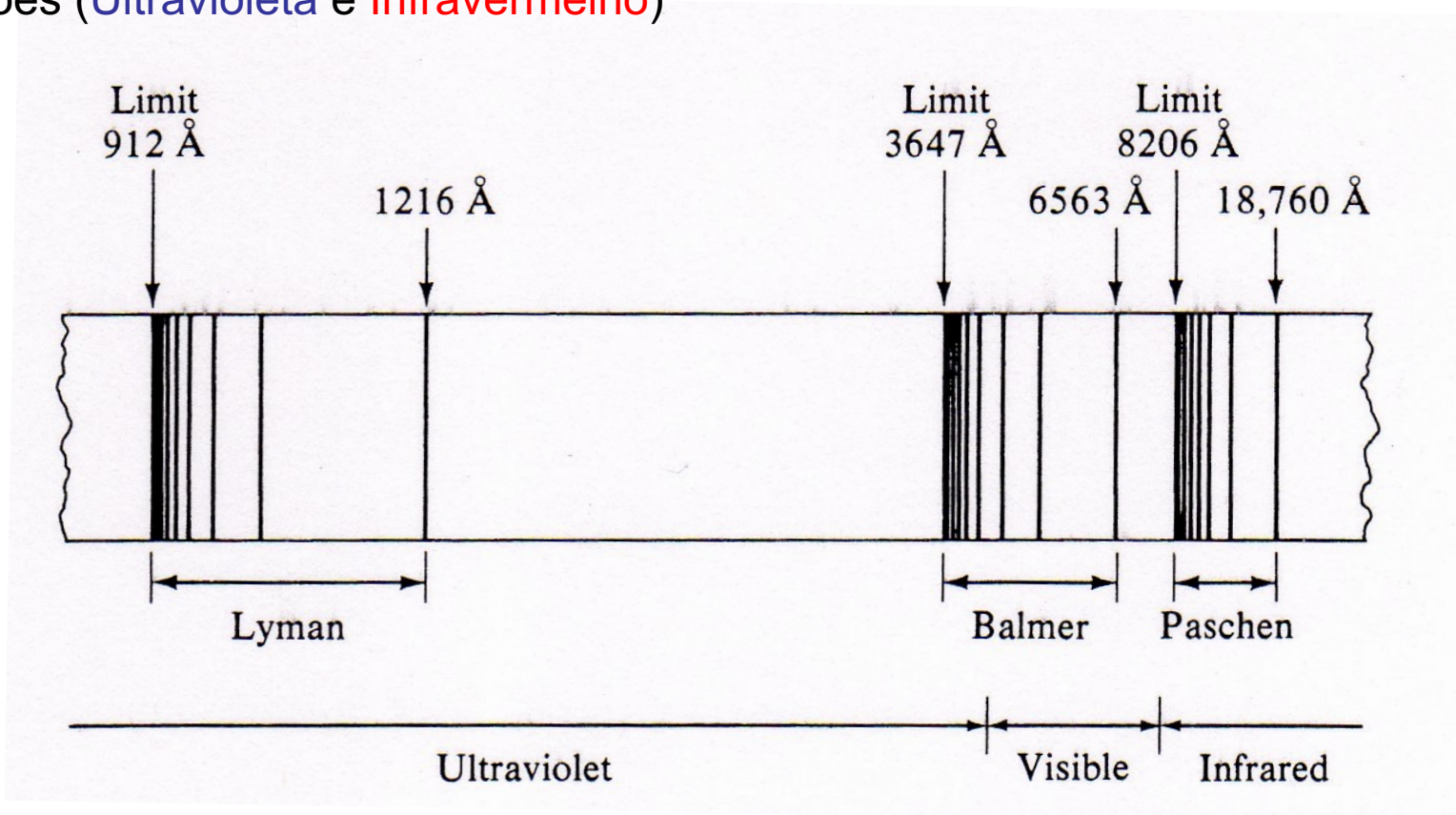


Limite da Série



# 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  $\text{cm}^{-1}$ .

# Johannes Rydberg (1888)



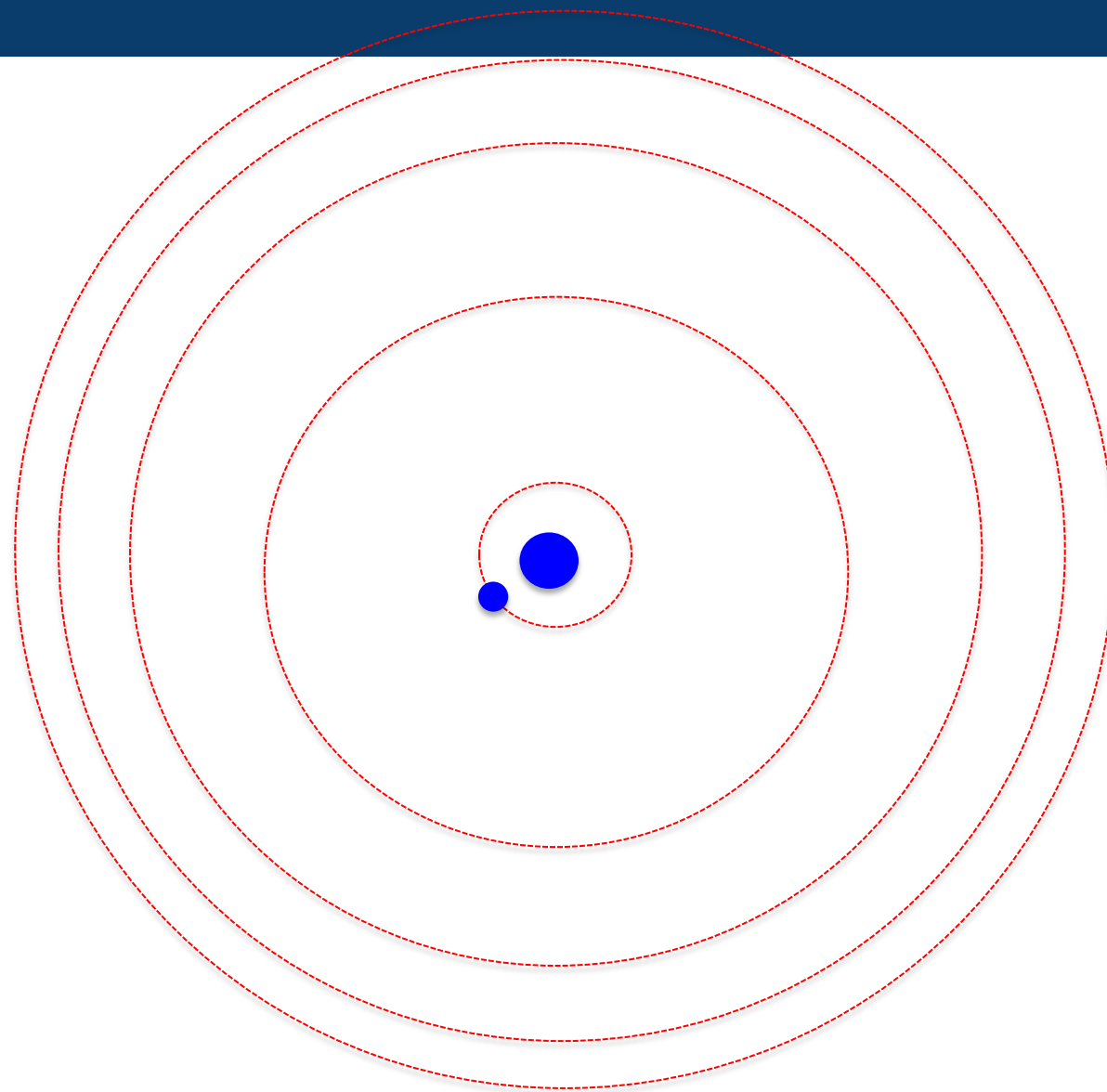
IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

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

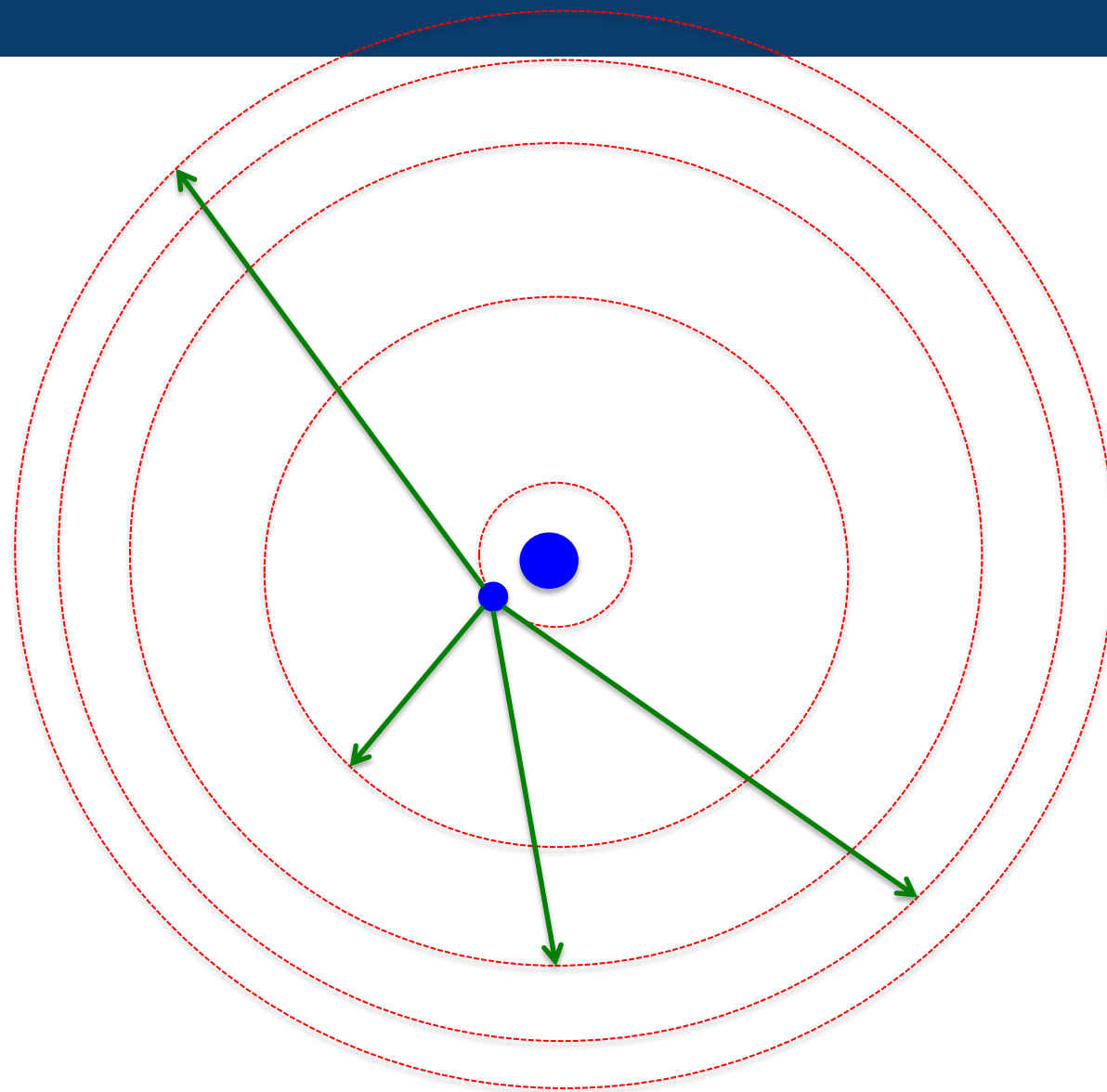
Nome	$n_1$	$n_2$	Região do espectro eletromagnético
Lyman	1	$n = 2, 3, 4, \dots$	Ultravioleta
Balmer	2	$n = 3, 4, 5, \dots$	Visível
Paschen	3	$n = 4, 5, 6, \dots$	Infravermelho
Bracket	4	$n = 5, 6, 7, \dots$	Infravermelho
Pfund	5	$n = 6, 7, 8, \dots$	Infravermelho
Humphreys	6	$n = 7, 8, 9, \dots$	Infravermelho

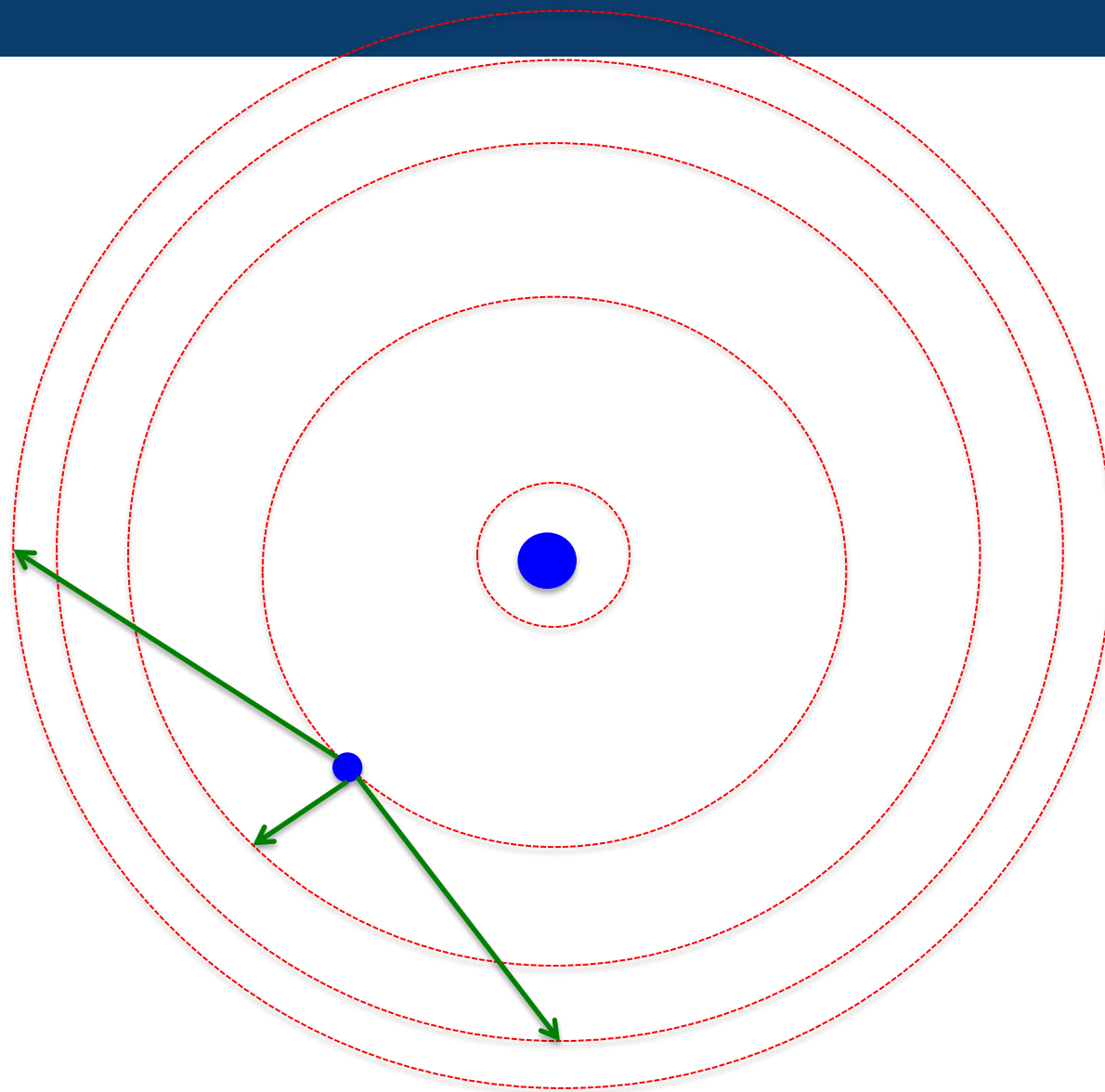


**O que isto tudo quer dizer?**



**Elétron girando em torno do núcleo**

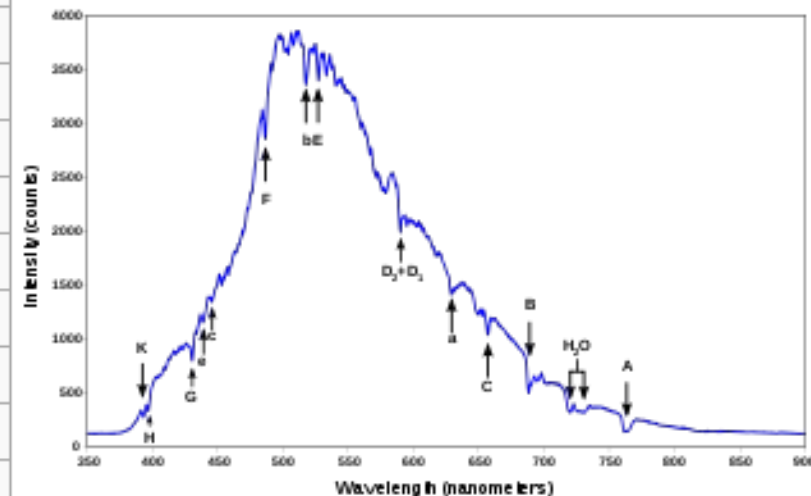




# Linhas de Fraunhofer



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





Por que podemos ter apenas órbitas específicas?

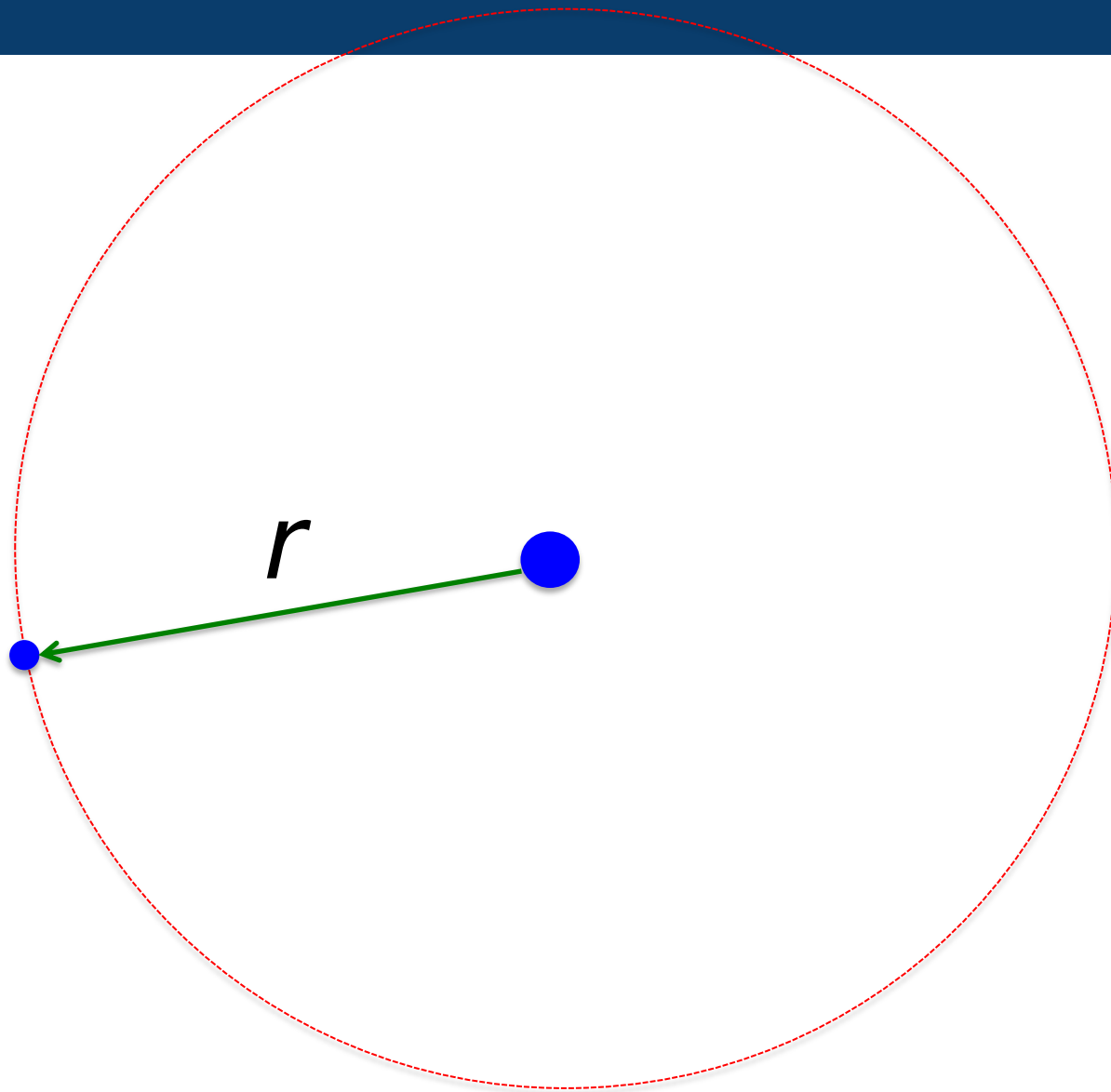




The screenshot shows the 'Levels of the Hydrogen Atom' simulation interface. The main window displays a Bohr model of a hydrogen atom with concentric orbits and a central nucleus. A 'Line of Hydrogen' is shown on the left, and a 'Ball of Hydrogen' is shown in the center. The 'Atomic Model' panel on the left includes options for 'Billiard ball', 'Wave function', 'Classical orbit system', 'Water', 'Orbitale', and 'Schrödinger'. The 'Experiment' and 'Prediction' panels are at the top left. The 'Electron energy level' panel on the right shows energy levels from  $n=1$  to  $n=2$ . The 'Spectrometer' panel at the bottom right shows a graph of photons emitted per nanosecond versus wavelength, with a prominent red line at approximately 656 nm. The 'Light controls' panel at the bottom center has 'White' and 'Visible spectrum' options. The simulation is titled 'Levels of the Hydrogen Atom (1).swf' and includes a 'Pause' button at the bottom.



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



# Movimento circular uniforme



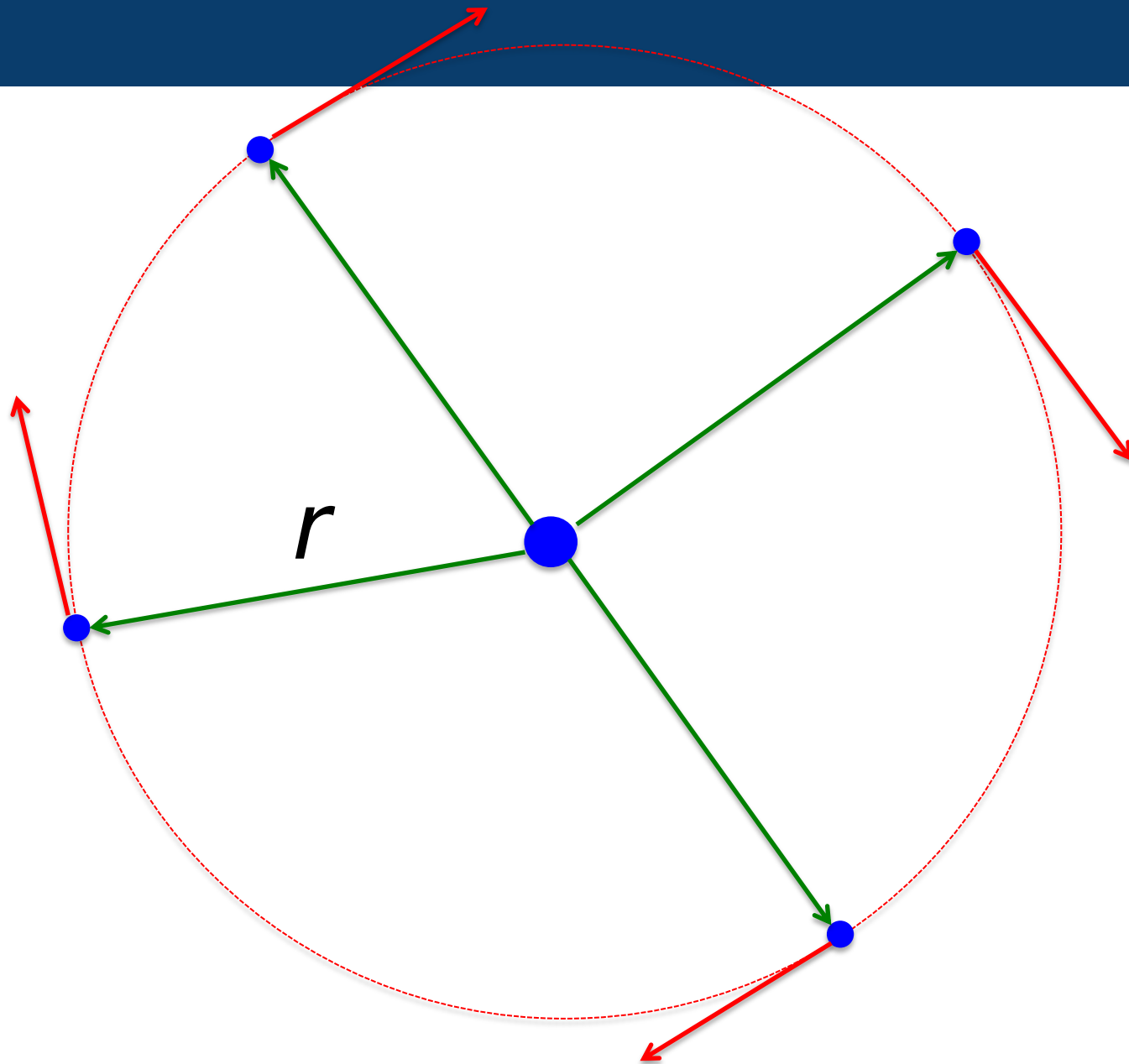
IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

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

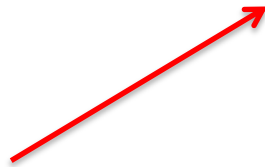


IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



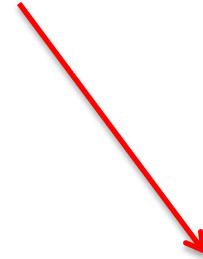
1

$\neq$



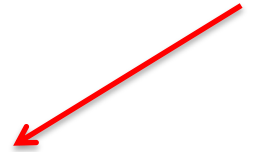
2

$\neq$



3

$\neq$

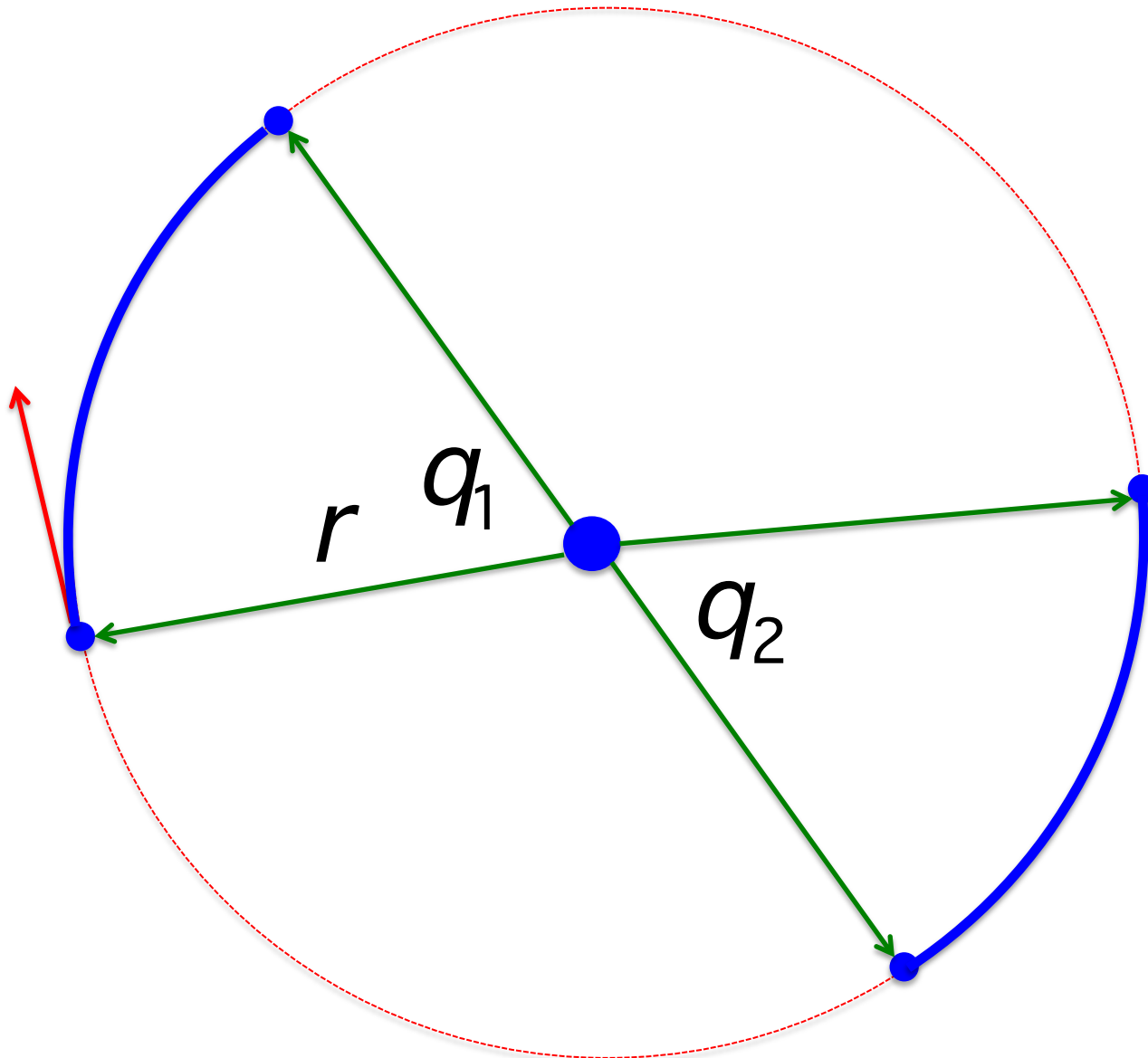


4

# Ângulos iguais em tempos iguais



IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



$$q_1 = q_2$$

$$t_1 = t_2$$

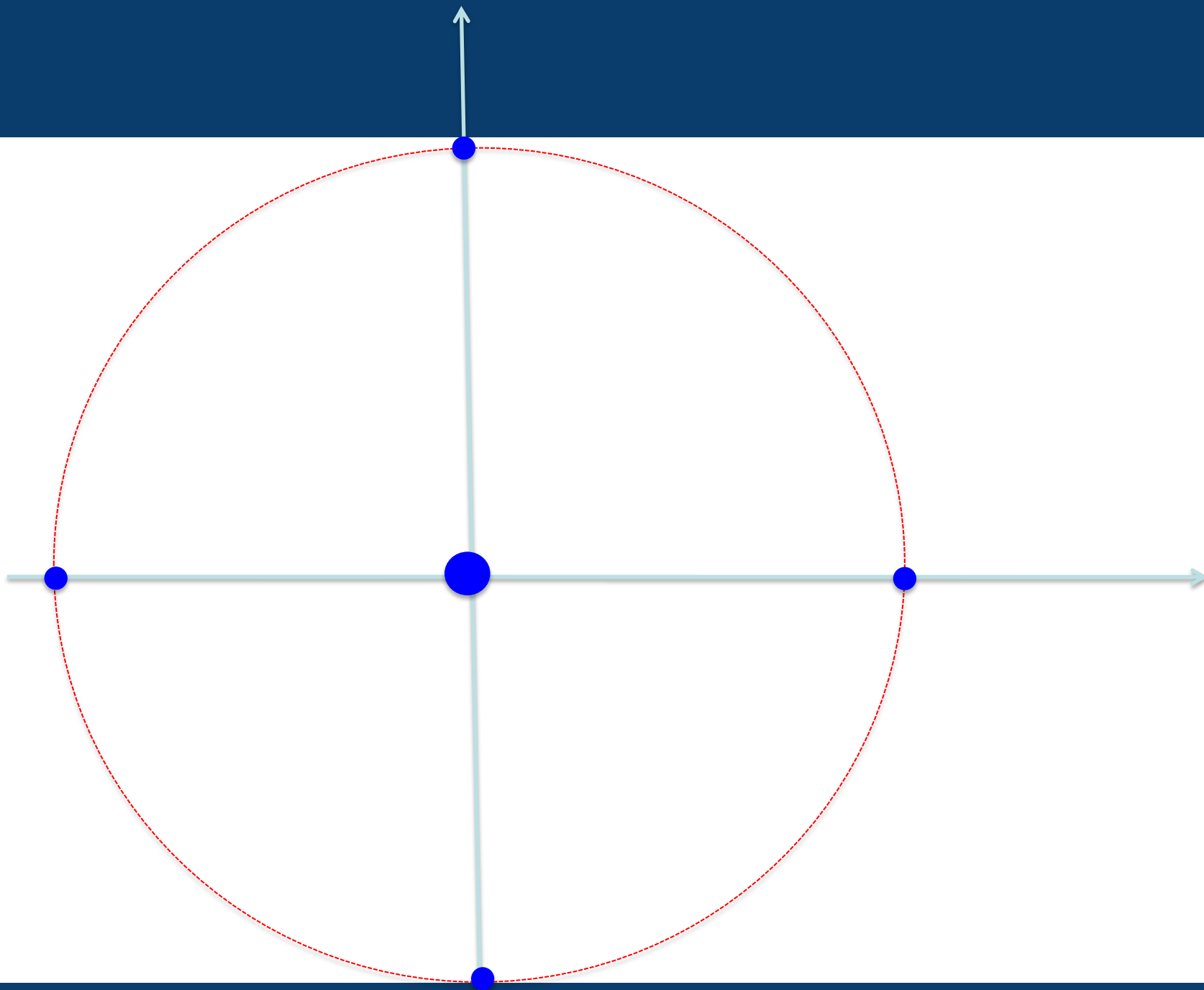


# Tempo para uma revolução completa



Período

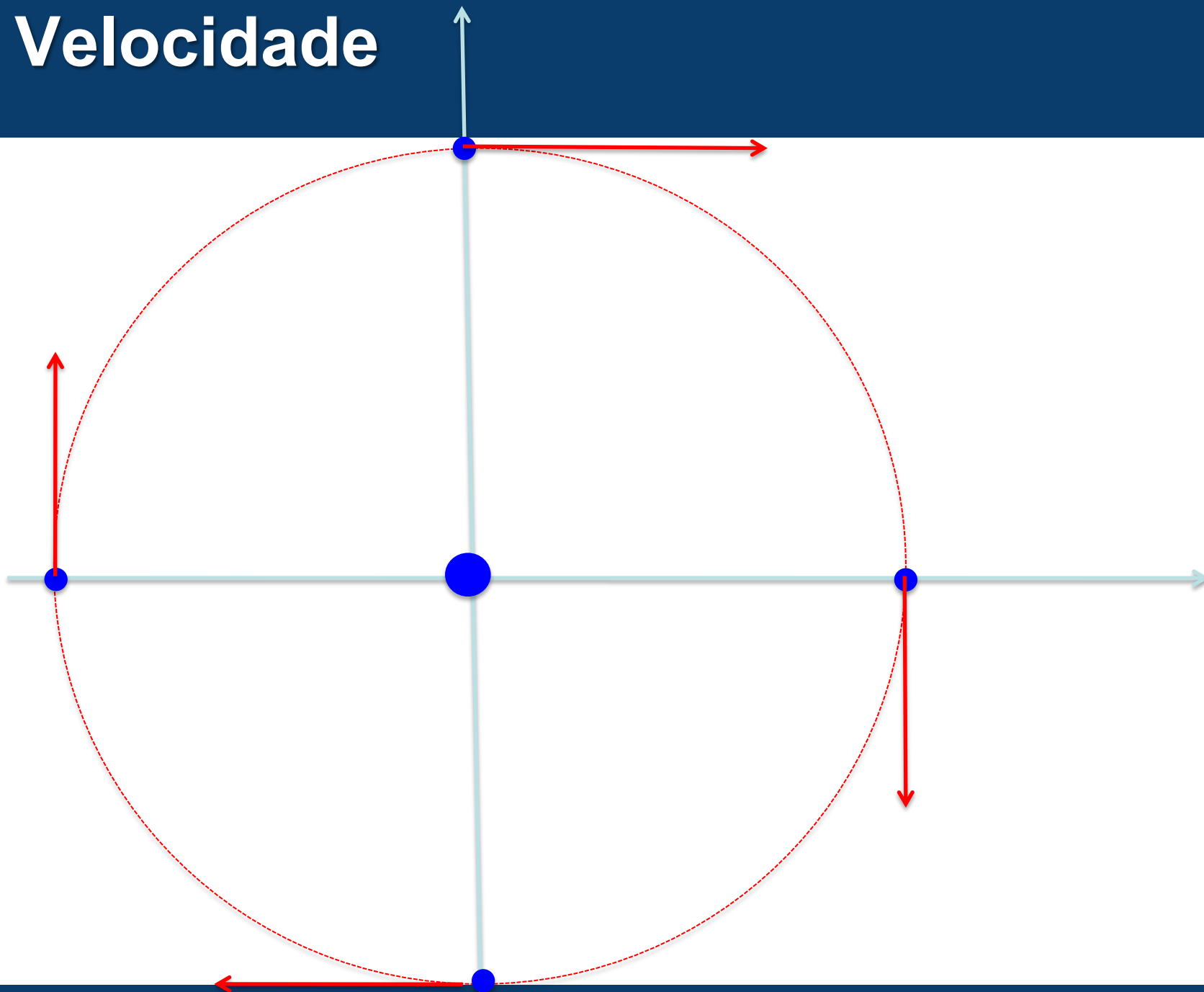
$$T = \frac{1}{f} = \frac{2\pi}{v}$$



# Velocidade



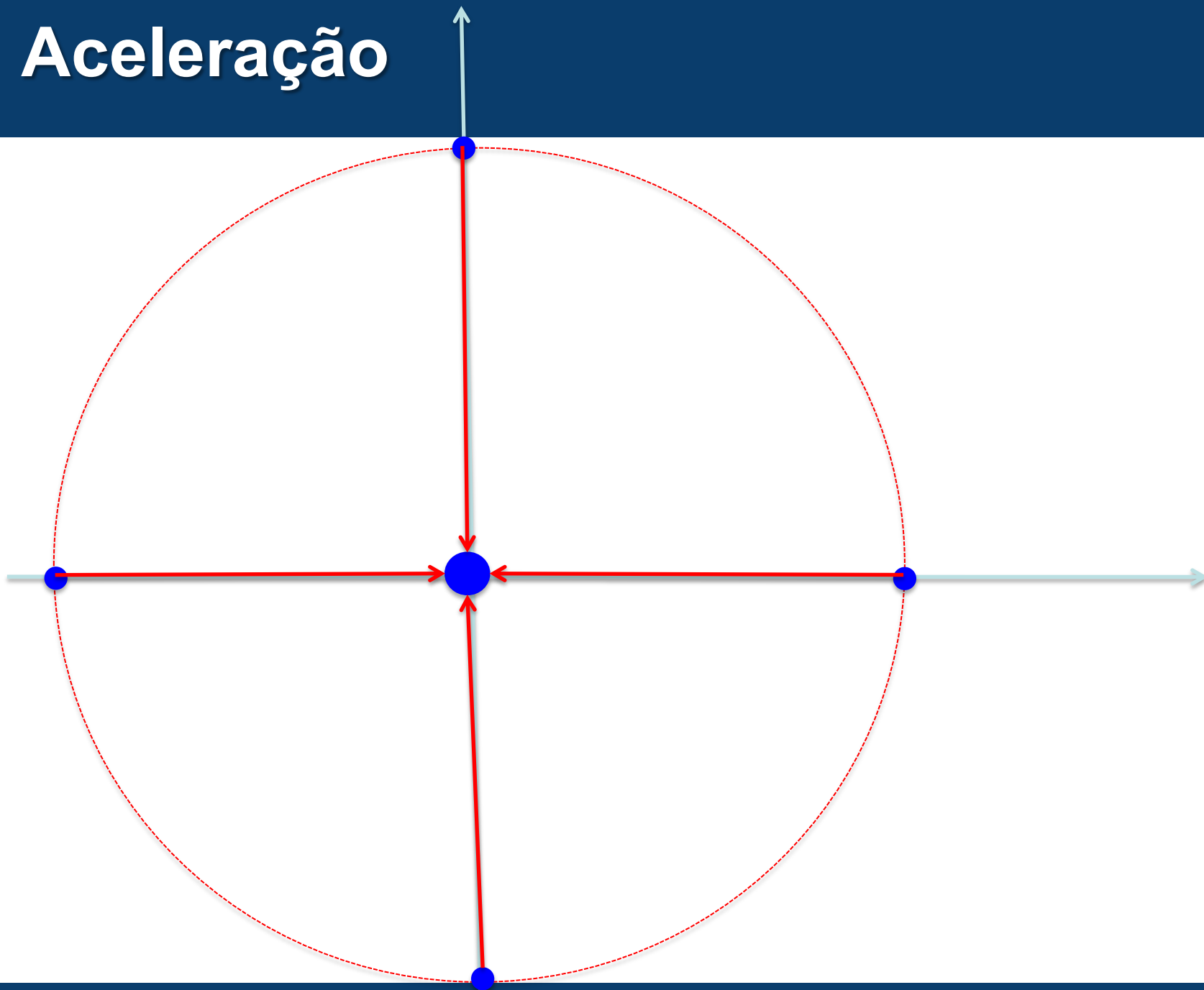
IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



# Aceleração



IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA



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

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



IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

# 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

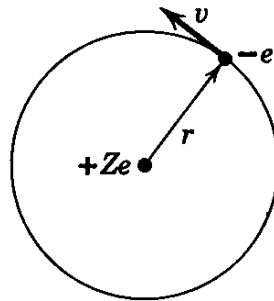
Niels Bohr (1885-1962)

# 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  
 $\epsilon_0$  - 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

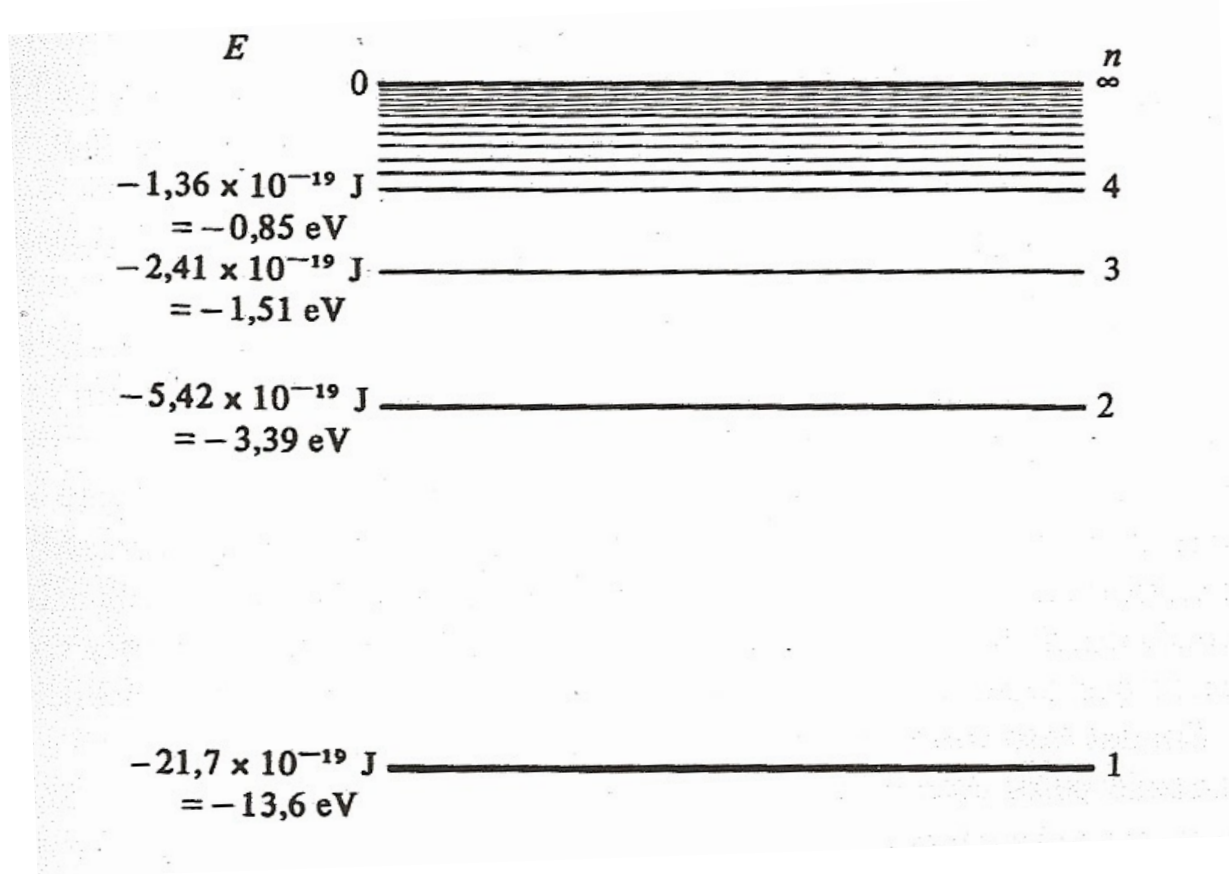
$$E = -\frac{mZ^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

**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



IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

- 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



IFT - UNESP  
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

- 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 as 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.